

# Новые материалы

## *Фиговский Олег и Гумаров Валерий*

Особые виды на искусственный интеллект имеют разработчики новых материалов. Тут нет страха перед ИИ, как, положим, при его привлечении к системам управления. Бунт машин тут не просматривается. Единственно, чем грозит ИИ при создании новых материалов – потеря работы для тех, кто ведет рутинную и однообразную работу при поиске химической формулы или физического состава перебором и апробацией большого числа комбинаций элементов в поисках нужных свойств и заданных характеристик нового материала. ИИ в этом деле гораздо эффективнее лаборантов и прочих научных работников, если, конечно, алгоритм грамотно построен. А вот тут как раз разработчикам и идут карты в руки: передача ИИ рутинной по проверке физических и химических свойств новых материалов предоставляет участникам процесса больше времени для работы ума при построении дорожной карты в направлении выхода на материалы с требуемыми свойствами.

Но то, так, очередные уговоры человекоек не страшиться искусственного интеллекта. А что на практике? Каков реальный вклад ИИ в создание новых материалов в биологии, физике, химии, инженерии?

Прежде всего, стоит заметить, что без новых материалов не было бы значимого развития и самого ИИ, не было бы технической базы для запуска алгоритмов, которым требуются огромные вычислительные ресурсы. Без новых материалов не создать мощные процессоры, заточенные под обеспечение работы ИИ. Такой как процессор от стартапа Kneron.

**Американская компания Kneron анонсировала появление своего нового чипа KL 720 SoC, который ориентирован на работу систем искусственного интеллекта, обработку изображений, видео и звука.** По словам представителей компании, процессор оказался в два раза энергоэффективнее, чем Movidius от Intel и в четыре раза мощнее, чем Coral Edge TPU от Google. Kneron пришла к таким выводам после тестирования KL 720 на модели MobileNetV2.

Чип нового поколения обеспечивает 1,5 TOPS мощности при энергопотреблении не более 1,2 Вт. Система основана на двух ядрах Arm Cortex-M4 и способна обрабатывать изображения и видео 4K с разрешением 1080p в режиме реального времени. Более того, если большая часть современных процессоров требует использовать «пробуждающее слово» и подключение к сети для полноценной обработки естественного языка, то KL 720 способен содержать полный словарь на самом устройстве. В таком случае, пользователю нужен лишь сам гаджет для взаимодействия с ИИ, он сможет работать без доступа к сети.

Kneron предлагает устанавливать новые процессоры в системах безопасности нового поколения, а также в домашнюю и носимую электронику. Сценарии использования предполагают оснащение камер видеонаблюдения, Smart TV, AR-очков и гарнитур виртуальной реальности технологиями машинного обучения. Кроме того, KL 720 может быть интегрирован в инфраструктуру Интернета вещей и системы распознавания лиц.

Еще одна проблема – энергоэффективность искусственных нейронных сетей. И здесь на помощь ИИ приходят создатели новых материалов и их смежники. **Команда инженеров из Университетского колледжа Лондона разработала новый подход к созданию нейронных сетей на основе мемристоров, работающих практически без ошибок.**

До сих пор считалось, что применение мемристоров и безошибочность вычислений при построении нейронных сетей несовместимы. Переход систем ИИ с транзисторной аппаратной базы на мемристоры увеличит энергоэффективность ИИ в 1000 раз, а это приведет к быстрому появлению мощных нейроморфных чипов.

Ученые давно выяснили, что система, в которой используются мемристоры для создания искусственных нейронных сетей, как минимум в 1000 раз более энергоэффективна, чем аппаратная платформа на основе транзисторов. Но перейти на нее не удавалось – она была сильнее подвержена ошибкам. Точность результатов системы на мемристорах значительно уступала точности такой же системы на транзисторах.

Команда из Университетского колледжа Лондона придумала, как решить эту проблему, и проведенное моделирование подтвердило, что оно верное. Решение оказалось удивительно простым. Ученые заставили мемристоры работать в нескольких подгруппах нейронных сетей и усреднили их вычисления. Таким образом, общая производительность незначительно снизилась, но количество ошибок сократилось практически до нуля.

Кроме того, ученые протестировали подход на нескольких типах мемристоров и обнаружили, что точность растет при использовании любой модели, независимо от материала или технологии изготовления.

Открытый метод борьбы с ошибками может стать основой для развития искусственного интеллекта нового поколения.

Появление мемристических нейронных сетей или нейроморфных чипов с энергоэффективностью в 1000 и более раз выше, чем у текущих транзисторных систем, позволит эффективно обучать нейронные сети вообще без подключения к внешним ресурсам. Их внутренних ресурсов будет для этого достаточно. Очевидно, что эта возможность перевернет не одну индустрию.

И ресурс этот обеспечивает сама природа мемристоров (их еще называют «резисторы с памятью»), так как они помнят количество электрического заряда, протекавшего через них даже после выключения. При этом мемристоры работают не только в двоичном коде, состоящем из нулей и единиц, но и на нескольких уровнях от нуля до единицы одновременно. Это означает, что каждый бит может вместить больше информации. А с учетом того, что оперативные данные обрабатываются и хранятся в одном месте, их не нужно при проведении расчетов постоянно отправлять в память и извлекать из нее, все это на порядки увеличивает эффективность таких систем по сравнению с транзисторами.

Авторы проекта утверждают, что на данном этапе их ИИ сравнялся с уже существующими нейросетями и выполняет задачи на том же уровне, но это только начало перспективной разработки. Ученые обещают построить первую функционирующую модель на основе мемристоров в течение трех лет.

**Ученые создали запоминающий информацию монослой из молекул соли, которая состояла из плоского органического катиона и неорганического аниона.** Под действием напряжения, накладываемого зондом электронного микроскопа, анион оказывался над алкильной частью катиона, затемняя ее на изображении микроскопа, и мог оставаться в таком положении даже при чтении информации до тех пор, пока ее специально не стирали.

По оценке авторов, бинарный носитель на практике может хранить от 20 до 30 терабит информации на квадратный сантиметр, а теоретически до 41 терабита.

Чтобы увеличить объем информации, который можно хранить на единице площади материалов, ученые создают различные молекулярные структуры. Большинство таких

систем получают в условиях высокого вакуума и низких температур (обычно менее 77 кельвин). Чаще всего в работах лишь описывают принцип переключения между бинарными состояниями молекул, но не демонстрируют на единичной молекуле или же не могут образовать мономолекулярный слой.

Одним из важнейших свойств, которым должно обладать молекулярное запоминающее устройство – это возможность работы при комнатной температуре и давлении. Кан Цуй и его коллеги из Левенского католического университета предложили систему для хранения информации в нормальных условиях, которая основана на супрамолекулярных изменениях соли из крупного плоского полиароматического органического катиона и небольшого аниона перхлората.

Они поместили раствор этой соли в октановой кислоте на поверхность золота Au (111), молекулы выстроились ровными рядами в супрамолекулярную структуру. Воздействуя электрическим полем иглы зонда сканирующего туннельного микроскопа, авторы изменяли дипольные молекулы так, что на изображении микроскопа они казались темными в сравнении с нетронутыми молекулами. Таким образом авторы записали четыре бита информации, которую смогли считать, сканируя всю поверхность в течение 30 минут.

Теоретически такие материалы могли бы хранить до 41 терабита информации на квадратный сантиметр, однако, авторы предполагают, что на практике будет возможно кодировать от 20 до 30 терабит информации на квадратный сантиметр. По их словам предложенный концепт кодирования информации в нормальных условиях делает нас на шаг ближе к применению таких технологий в повседневной жизни.

**Британские физики разработали новые пустотелые оптические волокна, которые скоро смогут сравняться в производительности с обычными стеклянными или пластиковыми волоконно-оптическими кабелями.** Передача света в воздушном, а не стеклянном сердечнике, как считают исследователи, дает множество преимуществ, и они неминуемо трансформируют оптические коммуникации.

В отличие от обычного волоконно-оптического кабеля, в котором свет движется через стекло или пластик, пустотелые обладают повышенной скоростью передачи сигнала. Однако их минус в том, что поток фотонов может легко отклониться от курса, что приведет к помехам. Новая технология, созданная учеными из Университета Саутгемптона, позволяет добиться меньшей потери данных и более высокой способности передачи данных, чем твердотелые стеклянные волокна.

За полтора года ученым удалось снизить показатель затухания света на порядок, с 3,5 дБ/км до всего 0,28 дБ/км, сделав его всего в два раза хуже, чем у обычных стеклянных оптических волокон. В то же время максимальная дальность широкополосной связи была увеличена в десять раз, с 75 до 750 км.

«Передача света в воздушном, а не стеклянном сердечнике дает множество преимуществ, которые могут трансформировать оптические коммуникации в том виде, в котором мы их знаем. Последние результаты еще больше сокращают разрыв в эффективности между пустотелыми и обычными оптическими волокнами, и вся команда надеется на еще большее увеличение показателей. Как видно из моделирования, это возможно», – сказал профессор Франческо Полетти.

*А когда искусственный интеллект чисто по-человечески поддерживают техническими разработками, то и у него дело спорится.*

**ИИ удалось создать искусственные белки.** Белки необходимы для жизни клеток, выполняя сложные задачи и катализируя химические реакции. Ученые и инженеры долгое

время стремились использовать эту мощь, создавая искусственные белки, которые могут выполнять новые задачи. Но многие процессы, предназначенные для создания таких белков, медленны и сложны. В рамках прорыва, который может иметь последствия для секторов здравоохранения, сельского хозяйства и энергетики, команда ученых разработала процесс под управлением ИИ, который использует большие данные для разработки новых белков.

Разрабатывая модели машинного обучения, которые могут просматривать информацию о белках, собранную из баз данных генома, ученые нашли относительно простые правила проектирования для создания искусственных заменителей. Когда команда сконструировала искусственные белки в лаборатории, они обнаружили, что они соперничали с теми, которые встречаются в природе.

«Мы все задались вопросом, как простой процесс, такой как эволюция, может привести к такому высокопроизводительному материалу, как белок. Мы обнаружили, что данные генома содержат огромное количество информации об основных правилах структуры и функционирования белка, и теперь мы смогли создать правила природы, чтобы самим создавать белки», – рассказал Рама Ранганатан, профессор кафедры биохимии и молекулярной биологии Pritzker Molecular Engineering

Белки состоят из сотен или тысяч аминокислот, и эти аминокислотные последовательности определяют структуру и функцию белка. Но понять, как создать эти последовательности для создания новых белков, было непросто. Прощая работа привела к методам, которые могут определять структуру, но функция была более неуловимой.

За последние 15 лет Ранганатан и его сотрудники осознали, что базы данных генома, которые растут в геометрической прогрессии, содержат огромное количество информации об основных правилах структуры и функционирования белка. Его группа разработала математические модели на основе этих данных, а затем начала использовать методы машинного обучения, чтобы раскрыть новую информацию об основных правилах проектирования белков.

Для этого исследования они изучили семейство метаболических ферментов хоризмат-мутаза, тип белка, который важен для жизни многих бактерий, грибов и растений. Используя модели машинного обучения, исследователи смогли выявить простые правила проектирования этих белков.

Модель показывает, что только сохранения в положениях аминокислот и корреляции в эволюции пар аминокислот достаточно для предсказания новых искусственных последовательностей, которые будут обладать свойствами семейства белков.

«Обычно мы предполагаем, что для того, чтобы что-то построить, нужно сначала глубоко понять, как это работает. Но если у вас достаточно примеров данных, вы можете использовать методы глубокого обучения, чтобы выучить правила проектирования, даже если вы не понимаете, как он работает или почему он построен таким образом», – поясняет Рама Ранганатан.

Затем он и его сотрудники создали синтетические гены для кодирования белков, клонировали их в бактерии и наблюдали, как бактерии затем производили синтетические белки, используя свои обычные клеточные механизмы. Они обнаружили, что искусственные белки имеют ту же каталитическую функцию, что и природные белки хоризмат-мутаза.

Поскольку правила проектирования настолько просты, количество искусственных белков, которые потенциально могут создать исследователи, чрезвычайно велико.

Хотя искусственный интеллект раскрыл правила проектирования, Ранганатан и его сотрудники все еще не до конца понимают, почему модели работают. Ученые будут проводить исследования, чтобы понять, как модели пришли к такому состоянию.

В то же время они также надеются использовать эту платформу для разработки белков, которые могут решать насущные социальные проблемы, такие как изменение климата. Рама Ранганатан и Эндрю Фергюсон основали компанию Evozyme, которая будет коммерциализировать эту технологию, применяя ее в энергетике, окружающей среде, катализе и сельском хозяйстве.

**Глубокое обучение и метаматериалы помогли ученым сделать звук видимым.** Объединив специально созданные материалы и нейронные сети, исследователи из EPFL (Федеральная политехническая школа Лозанны, Швейцария) во главе с Роменом Флери показали, что звук можно использовать в изображениях с высоким разрешением.

Визуализация позволяет изобразить объект посредством анализа дальнего поля световых и звуковых волн, которые он передает или излучает. Чем короче волна, тем выше разрешение изображения. Однако до сих пор уровень детализации ограничен размером рассматриваемой длины волны. Исследователи из Лаборатории волновой инженерии EPFL успешно доказали, что длинная и, следовательно, неточная волна (в данном случае звуковая волна) может выявить детали, которые в 30 раз меньше ее длины.

Для этого исследовательская группа использовала комбинацию метаматериалов и искусственного интеллекта. Их исследование открывает новые захватывающие возможности, особенно в областях медицинской визуализации и биоинженерии.

Новаторская идея команды заключалась в том, чтобы объединить две отдельные технологии, которые ранее разделили границы визуализации. Одной из них является технология метаматериалов – специально созданных элементов, которые могут, например, точно фокусировать длины волн. Тем не менее, они теряют свою эффективность из-за случайного поглощения сигналов, что затрудняет их расшифровку. Другая технология – это искусственный интеллект или, более конкретно, нейронные сети, которые могут быстро и эффективно обрабатывать даже самую сложную информацию, хотя это требует обучения.

Чтобы превысить дифракционный предел (минимальное значение размера пятна, которое можно получить, фокусируя электромагнитное излучение) исследовательская группа провела следующий эксперимент.

Сначала они создали решетку из 64 миниатюрных динамиков, каждый из которых можно активировать в соответствии с пикселями изображения. Затем они использовали решетку для воспроизведения звуковых образов цифр от нуля до девяти с точными пространственными деталями. Изображения цифр, введенные в решетку, были взяты из базы данных, содержащей около 70 000 рукописных примеров. Напротив решетки исследователи поместили мешок с 39 резонаторами Гельмгольца (сферы диаметром 10 см с отверстием на одном конце), которые и образовали метаматериал. Звук, производимый решеткой, передавался метаматериалом и улавливался четырьмя микрофонами, расположенными на расстоянии нескольких метров. Затем алгоритмы расшифровали звук, записанный микрофонами, чтобы научиться распознавать и перерисовывать исходные цифровые изображения.

Команда добилась почти 90% успеха в своем эксперименте.

В области медицинской визуализации использование длинных волн для наблюдения за очень маленькими объектами могло бы стать большим прорывом.

«Длинные волны означают, что врачи могут использовать гораздо более низкие частоты, в результате чего методы акустической визуализации эффективны даже через плотную костную ткань. Когда дело доходит до визуализации с использованием электромагнитных волн, длинные волны менее опасны для здоровья пациента. В приложениях мы не будем обучать нейронные сети распознавать или воспроизводить числа, а скорее органические структуры», – рассказал Ромен Флери, руководитель исследовательской группы в EPFL

*Обращаясь к работам в области новых материалов, которые непосредственно не связаны с искусственным интеллектом, следует обратить внимание на следующие разработки.*

**Новый фотокатализатор улучшил прямое преобразование воды в водород.** Мировой экономике нужно все больше энергии, но наращивать объемы выработки без ущерба для окружающей среды непросто. Израильские ученые добились рекордного КПД преобразования воды в водородное топливо при помощи солнечной энергии – они сразу удвоили предыдущее достижение. Еще немного и искусственный фотосинтез станет экономически выгодным. Для этого уже достигнутую эффективность нужно увеличить всего на 20-30%.

Группа ученых из Израильского технологического института представила на заседании Американского химического общества фотокатализатор, который может превращать воду в водородное топливо с помощью солнечного света.

В 2016 году ученые разработали гетероструктуру со сферическими квантовыми точками из кадмия-селенида, заключенную в стержень из сульфида кадмия. Частицы кадмия-селенида притягивали положительные заряды, а отрицательные аккумуляровались на конце стержня, где размещались частицы платины. КПД реакции восстановления составил 100%.

Однако для полноценного функционирования фотокаталитическая система должна поддерживать и реакцию восстановления, и реакцию окисления, которая происходит в несколько этапов и представляет поэтому определенную сложность. Вдобавок, ее побочные продукты ухудшают стабильность полупроводника. Поэтому исследователи обратились к новому соединению – бензиламину. И обнаружили, что могут вырабатывать водород из воды, одновременно превращая бензиламин в бензойный альдегид.

«В этом исследовании мы трансформировали процесс из фотокатализа в фотосинтез, то есть, произошла настоящая конверсия солнечной энергии в топливо», – сказала Лилак Амирав, руководитель проекта.

Фотокаталитическая система совершила преобразование солнечной энергии в способные сохраняться химические связи с коэффициентом конверсии солнечной энергии в химическую 4,2%. Это новый мировой рекорд в области фотокатализа, в два раза превосходящий прошлый результат.

Министерство энергетики США установило границу практической реализуемости технологии выработки водорода в результате фотокатализа в 5-10%. Так что, по словам ученых, они в одном шаге от экономически выгодного прямого преобразования солнечной энергии в топливо.

Для дальнейшего роста эффективности процесса ученые задействовали искусственный интеллект, который должен помочь им с поиском новых соединений с высокими солнечно-химическими превращениями. Скорее всего, в природе есть что-то более эффективное, чем бензиламин.

**Американские физики нашли идеального кандидата на роль фотокатализатора для расщепления воды на водород и кислород.** Им оказался перовскит – редкий минерал, который обещает прорыв не только в синтезе водорода, но и в солнечной энергетике.

**В МГУ создали базу данных перспективных перовскитов.** Российские исследователи собрали все перспективные для солнечной энергетике слоистые перовскитоподобные соединения в единую базу данных. Это помогло обнаружить закономерности между структурой и свойствами таких соединений.

Гибридные соединения с перовскитной структурой стали популярны среди исследователей в последние 10 лет благодаря их уникальным оптическим и электронным свойствам. Такие материалы уже стали основой солнечных батарей, светодиодов, лазеров, фотосенсоров, детекторов рентгеновского излучения и так далее. Перовскиты уже обеспечивают рекордную эффективность солнечных панелей, которые ученые создают на их основе.

Несколько лет назад химики выделили интересный подкласс этих материалов – слоистые перовскитоподобные соединения. Они имеют большее структурное разнообразие и широкий диапазон химических составов. Кроме того, такие вещества стабильнее и могут служить дольше в качестве компонентов оптоэлектронных устройств.

Теперь исследователи лаборатории новых материалов для солнечной энергетики МГУ проанализировали сотни литературных источников и впервые создали пополняемую базу данных структуры и свойств перовскитоподобных слоистых соединений. На сегодня в ней уже находится информация о 500 материалах.

Используя кристаллохимический анализ и методы квантовой химии ученые смогли рассчитать структурные и электронные свойства таких соединений. С помощью машинного обучения они также смогли проанализировать данные и обнаружили закономерности между строением слоистых перовскитов и их свойствами. Кроме того, такой подход позволил спрогнозировать неизвестные свойства некоторых соединений и найти самые перспективные объекты исследований.

«Мы провели детальный кристаллохимический анализ всех собранных соединений и выявили важные корреляции между геометрическими параметрами структуры и оптическими свойствами слоистых перовскитоподобных соединений. Это позволило нам сделать важные обобщения для всего класса данных соединений, которые позволят выявить новые перспективные материалы с выдающимися функциональными характеристиками. Мы внимательно следим за развитием этой области исследований и будем регулярно дополнять нашу базу данных информацией о новых материалах. В настоящий момент мы работаем над новыми исследованиями, опирающимися на углубленный анализ информации, собранной в созданной базе данных с кристаллохимической точки зрения», — говорит руководитель исследования Алексей Тарасов, кандидат химических наук, заведующий лабораторией новых материалов для солнечной энергетике факультета наук о материалах МГУ и старший научный сотрудник химического факультета МГУ.

**Материаловеды сделали электрохимический глаз с сетчаткой из нанонитей перовскита.** Ученые разработали электрохимический глаз с высокой разрешающей способностью и скоростью отклика. Хрусталик они заменили на линзу, стекловидное тело – на ионный электролит, сетчатку – на светопоглощающий массив нанонитей перовскита, а вместо нейронов использовали жидкометаллические провода из галлия и индия. Такая система успешно распознала буквы I, U, A и E.

Человеческие глаза за счет вогнутой полусферической сетчатки и светоправляющих компонентов внутриглазной жидкости обладают широким полем зрения в 150-160 градусов, высоким разрешением в одну угловую минуту (одна шестидесятая градуса), а также хорошей адаптивностью. Исходя из этого, ученые и инженеры заинтересованы в разработке искусственного аналога. Предполагается, что он найдет применение в робототехнике.

В сетчатке человеческого глаза расположены палочки (отвечают за изумрудно-зеленую область спектра и обеспечивают ночное зрение) и колбочки (фиолетово-синяя, зелено-желтая и желто-красная области спектра). Их плотность достигает десяти миллионов на квадратный сантиметр со средним шагом в три микрометра, что и создает такую высокую разрешающую способность. На сегодняшний день инженеры производят доступные сенсоры на основе приборов с зарядовой связью и комплементарных структур металл-оксид-полупроводник, которые в основном используют плоскую архитектуру из-за распространенного процесса получения плоских микросхем. Подобные устройства уже достигли схожей разрешающие способности, но из-за технологической сложности получения устройства в форме полусфер практически не реализуются. Кроме того, в последнее время ученые активно развивали светопоглощающие массивы гибридных перовскитов в качестве фотодетекторов.

Чжиюн Фань с коллегами из Гонконгского университета науки и технологии представили искусственную зрительную систему на основе сферических электрохимических глаз с полусферической сетчаткой из плотного массива нанонитей светочувствительного гибридного перовскита. В качестве аналога стекловидного тела они использовали жидкий ионный электролит, а жидкометаллические провода соединяли светочувствительную структуру с выводными контактами. Такая система показала низкий предел обнаружения и широкое поле зрения. Более того, светочувствительный слой получился более плотным, чем у человеческого глаза, что повышает разрешающую способность зрительной системы.

Ученые получили такой глаз следующим образом. С помощью полусферических пресс-форм они изгибали алюминиевую фольгу с толщиной в полмиллиметра для получения полусферической оболочки, которую затем подвергали анодизации для получения пористого слоя оксида алюминия толщиной в 40 микрометров с заданным размером пор. После этого авторы нанесли свинец на дно пор алюминиевой матрицы методом электроосаждения и затем протравили поверхность для избавления от незаполненной матрицы и оставшегося алюминия. Полученные пленки перенесли в трубчатую печь и подвергали конверсии в нанонити перовскита – йодида свинца формамина. Для увеличения адгезии на поверхность пленок напылили слой индия в 20 нанометров.

Контактный массив жидкого металла исследователи обеспечили полидиметилсилоксановой формой в виде ежа (такую форму напечатали на 3D принтере). В мягкие трубки они залили расплав индия и галлия, а затем соединили форму со светочувствительным слоем. Чтобы избежать точечного подключения каждого пикселя нанопроводами напрямую, ученые использовали жидкий металл, который самостоятельно создаст контакт за счет поверхностного натяжения. В передней алюминиевой полусфере глаза авторы работы сделали отверстие, а остальную часть полусферы покрыли вольфрамом, который служит противозлектродом для электрохимического оптического детектора. Они склеили полусферы между собой с помощью эпоксидного клея, во



внутреннюю область залили жидкий ионный электролит бис(трифторметилсульфонил)имид и йодид 1-бутил-3-метилимидазола, а в конце приклеили в отверстие передней полусферы собирающую линзу. Авторы сконструировали прототип с сотней пикселей с разрешением в 1,6 миллиметра из-за толщины жидких проводов, которую сложно уменьшить до нескольких микрометров, однако в будущем они намерены использовать металлические микроиглы микрометрового диаметра.

Массив из нанопроводов перовскита имеет минимальное разрешение в 500 нанометров, что соответствует плотности пикселей в 460 миллионов на квадратный сантиметр, что гораздо больше, чем в человеческой сетчатке, что потенциально можно будет использовать в оптических сенсорах для имитации человеческих глаз, если решить проблему электрического контакта каждого пикселя.

**Создана уникальная электронная кожа.** Исследователи разработали электронную искусственную кожу, которая реагирует на боль так же, как и настоящая. Это открытие открывает путь к лучшему протезированию, более умной робототехнике и неинвазивным альтернативам кожным трансплантатам.

Прототип устройства, разработанный командой из Университета RMIT в Мельбурне, Австралия, может в электронном виде воспроизвести то, как человеческая кожа ощущает боль. Устройство имитирует почти мгновенную обратную связь организма и может реагировать на болезненные ощущения с той же скоростью, с которой нервные сигналы поступают в мозг.

Ведущий исследователь профессор Мадху Бхаскаран сказал, что прототип датчика боли стал значительным шагом вперед в направлении биомедицинских технологий и интеллектуальной робототехники следующего поколения.

«Кожа – самый большой сенсорный орган нашего тела со сложными функциями, предназначенными для отправки сигналов быстрого оповещения, когда что-то болит. Мы все время ощущаем вещи через кожу, но наша реакция на боль проявляется только в определенный момент, например, когда мы касаемся чего-то слишком горячего или слишком острого. Никакие электронные технологии не могли реалистично имитировать это очень человеческое чувство боли – до сих пор. Наша искусственная кожа мгновенно реагирует, когда давление, жара или холод достигают болезненного порога. Это важный шаг вперед в будущем развитии сложных систем обратной связи, необходимых нам для создания действительно интеллектуальных протезов и интеллектуальной робототехники», – рассказал ведущий исследователь, профессор Мадху Бхаскаран.

Помимо прототипа датчика боли, исследовательская группа разработала устройства с растягивающейся электроникой, которые могут определять и реагировать на изменения температуры и давления.

Бхаскаран, соруководитель группы функциональных материалов и микросистем в RMIT, сказал, что три функциональных прототипа были разработаны для передачи ключевых функций чувствительности кожи в электронной форме. При дальнейшем развитии растяжимая искусственная кожа может стать будущим вариантом для неинвазивных кожных трансплантатов, где традиционный подход нежизнеспособен или не работает.

«Нам необходимо дальнейшее развитие, чтобы интегрировать эту технологию в биомедицинские приложения, но основы – биосовместимость, растяжимость, напоминающая кожу – уже есть», – заявил ученый.

Новое исследование, поданное в качестве предварительного патента, сочетает в себе три технологии, ранее разработанные и запатентованные командой:

- Эластичная электроника: сочетание оксидных материалов с биосовместимым силиконом для создания прозрачной, небьющейся и пригодной для носки электроники толщиной с наклейку.

- Температурно-реактивные покрытия: самомодифицирующиеся покрытия в 1000 раз тоньше человеческого волоса на основе материала, который трансформируется под действием тепла.

- Память, имитирующая мозг: электронные ячейки памяти, которые имитируют способ, которым мозг использует долговременную память для вызова и сохранения предыдущей информации.

Прототип датчика давления сочетает в себе растягиваемую электронику и ячейки долговременной памяти, тепловой датчик объединяет термореактивные покрытия и память, а датчик боли объединяет все три технологии.

Доктор философии Атаур Рахман сказал, что клетки памяти в каждом прототипе отвечают за запуск реакции, когда давление, тепло или боль достигают установленного порога.

«По сути, мы создали первые электронные соматосенсоры, воспроизводящие ключевые особенности сложной системы нейронов, нервных путей и рецепторов организма, которые управляют нашим восприятием сенсорных стимулов. В то время как некоторые существующие технологии использовали электрические сигналы для имитации различных уровней боли, эти новые устройства могут реагировать на реальное механическое давление, температуру и боль и обеспечивать правильный электронный отклик. Это означает, что наша искусственная кожа знает разницу между легким прикосновением пальца к булавке или случайным уколом ею – важное различие, которое никогда раньше не достигалось с помощью электроники», – рассказал доктор философии Атаур Рахман.

**В ЖК-полимере научились создавать разные рельефы.** Исследователи из России и Чехии впервые смогли создать жидкокристаллические полимеры, рельефом поверхности которых можно управлять с помощью лазеров. Такие материалы найдут применение в качестве бесконтактных модификаторов поверхности.

Жидкие кристаллы сочетают свойства жидкости и твердых кристаллов. Они принимают форму сосуда и в то же время имеют анизотропию – разные физические свойства в зависимости от направления движения. Небольшие тепловые, механические, магнитные или электрические воздействия на такие материалы позволяют управлять положением их молекул и, как следствие, оптическими свойствами. Эта особенность позволила использовать жидкие кристаллы в элементах дисплеев.

Еще в 1970-х исследователи смогли синтезировать первые ЖК-полимеры гребнеобразного строения. Их объемная структура состоит из нескольких молекулярных фрагментов. Первый из них – это группы, ответственные за образование ЖК-фаз. Они соединяются с полимерной цепью с помощью гибких алкильных цепочек. В качестве таких соединительных групп ученые часто используют молекулярные структуры, реагирующие на световое воздействие. Синтез таких материалов проходит «снизу вверх» – так же, как в живых системах из аминокислот собираются белки.

«На данный момент создание различных топографий поверхностей, их дальнейшее изменение и настройка – одно из самых перспективных направлений «интеллектуального»

материаловедения, – говорит декан химического факультета МГУ, член-корреспондент РАН Степан Николаевич Калмыков. – Для пленок и покрытий, которые могут менять рельеф поверхности, также становится возможным управлять адгезией, смачиваемостью и другими свойствами поверхности. Фотохромные ЖК-полимеры позволяют управлять этими свойствами дистанционно, с помощью света».

Исследователи МГУ вместе с коллегами из Института биоорганической химии РАН и чешскими учеными придумали материалы, которые можно использовать в качестве бесконтактных модификаторов поверхности. Для этого ученые сначала синтезировали фотохромные мономеры, а затем полимеризовали их и исследовали фазовое поведение и фотооптические свойства. Основное внимание авторы уделили фотомодификации поверхности. В качестве основы полимеров ученые использовали полиметакрилат. В качестве мезогенных групп они выбрали азобензольные молекулы с разными заместителями в бензольном кольце.

Ученые выяснили, что пленки этих полимеров под сфокусированным поляризованным светом зеленого и красного лазеров показывают разную деформацию. При действии зеленого света на поверхности образуются «кратеры», тогда как для красного света ученые наблюдали асимметричные «холмы». Параметры рельефных элементов не превышают нескольких десятков нанометров.

**Созданы новые функциональные материалы на основе магнитных жидкостей.** Исследователи Северо-Кавказского федерального университета изучают эффекты гидродинамических взаимодействий в магнитных коллоидах. Представители вуза создали на основе магнитных жидкостей новые функциональные материалы.

Эти материалы способны реагировать на действие внешних силовых полей и в зависимости от этого менять свои свойства. Поведение этих материалов определяется конкретными условиями, в которых они в данный момент находятся.

«Магнитные жидкости – искусственно созданные материалы. Ими могут быть, например, вода или масло, в которые добавлены мельчайшие наночастицы магнитного вещества: железа, кобальта или никеля. Находясь в беспорядочном тепловом движении, они придают всей жидкости способность взаимодействовать с магнитным полем. Представьте, субстанция, похожая на крепкий кофе или чёрный чай. Однако, если поднести магнит, она немедленно притянется к нему. Такое поведение не свойственно никаким другим жидким средам, встречающимся в природе, и оно открывает широкие перспективы», – поясняет один из авторов проекта, доцент кафедры общей и теоретической физики Артур Закинян.

С помощью магнитного поля жидкость можно перемещать или удерживать в нужном месте пространства, придавать ей необходимую форму. Более того, это делается дистанционно, без прямого контакта с веществом, так как магнитные силы могут действовать на значительном расстоянии.

Для создания вещества группа учёных СКФУ поместила в магнитный коллоид стабилизированные микрочастицы разнообразных материалов, обладающих различной микрогеометрией. Магнитные наночастицы коллоида в магнитном поле оказывают упорядочивающее действие на введенные микрочастицы, создавая в такой многокомпонентной среде организованную микроструктуру, что существенно влияет на макроскопические свойства материала. К подобным материалам также относятся магнитодиэлектрические эмульсии на основе магнитных коллоидов, изучению которых также посвящены исследования в рамках данного проекта.

Исследователи комплексно изучают различные механизмы взаимодействий частиц в композиционных материалах и динамику процессов структурообразования. Так, было обнаружено, что создаваемая внешним магнитным полем микроструктура композиционных сред существенно влияет на перенос заряда и изменяет электрофизические свойства среды. Диэлектрическая проницаемость и проводимость материалов могут изменяться под действием поля. Существенные трансформации претерпевают также теплофизические характеристики созданных материалов, их теплопроводность изменяется в несколько раз при воздействии внешнего магнитного поля. Подобным образом, регулируя микрометрию созданных сред магнитным полем, оказалось возможным управлять закономерностями проявления и динамикой изменения магнитных и реологических свойств синтезированных материалов.

Созданные новые функциональные материалы имеют перспективу применения в системах, где можно регулировать свойства материалов: управляемых электротехнических модулях, устройствах управления обменными процессами. Такие вещества могут применяться в медицине, при создании специализированного оборудования, а также в микрофлюидике – междисциплинарной области науки, которая исследует проблему управления малыми объемами жидких сред.

**Умная губка поможет дешево и быстро убрать разливы нефти и других маслянистых веществ.** Разливы нефти оказывают разрушительное влияние на морскую среду – птицы, попавшие в разлив, не могут взлететь и погибают. Сейчас очистка от разливов – сложный и дорогой процесс, в ходе которого используются химические диспергаторы для расщепления масла на очень маленькие капли, а также обезжиривание маслянистых веществ и поглощение их дорогостоящими, не пригодными для повторного использования сорбентами.

Губка, разработанная учеными из Северо-Западного университета США, представляет собой нанокompозитное покрытие из магнитных наноструктур на углеродной подложке, которая является олеофобной (притягивает нефть), гидрофобной (отталкивает воду) и магнитной.

Нанопористая трехмерная структура нанокompозита избирательно взаимодействует с молекулами маслянистого вещества и связывается с ними, улавливая и храня их до тех пор, пока оно не будет выдавлено. Магнитные наноструктуры наделяют умную губку двумя дополнительными функциями – контролируемым движением в присутствии внешнего магнитного поля и десорбцией адсорбированных компонентов.

Исследователи отмечают, что покрытие, которое представляет собой основу разработки, может быть нанесено на любую губку. Оно позволит губке впитать на 30% больше маслянистого вещества, чем составляет ее собственный вес. А после выжимания на ней остается не более 1% впитанной нефти.

**Из металлоорганических каркасов создали настраиваемые мембраны.** Сотрудники Научно-технологического университета имени короля Абдаллы создали мембраны, размер пор которых можно настраивать с помощью облучения определенными длинами волн.

Металлоорганические и цеолитные каркасы – это макромолекулярные структуры, которые в последнее время все больше привлекают ученых. Эти легкие кристаллические пористые наноматериалы созданы из органических молекулярных строительных блоков, которые удерживаются вместе сильными ковалентными связями.

Такие соединения стабильны в водных и органических растворителях, а также имеют четко определенную топологию и размер пор, что делает их привлекательными для применения во многих областях, включая адсорбцию и разделение газов, накопление и преобразование энергии, оптоэлектронику, химическое зондирование и доставку лекарств. Однако эти структурные особенности изменить нельзя, что ограничивает применимость мембран на их основе.

В новой работе химики представили мембрану, которая способна изменять свою структуру под действием излучения. Для этого авторы включили в органическую «сетку» азобензольные блоки, которые могут принимать две различные конфигурации в зависимости от длины волны облучения: атрансlineарную геометрию при воздействии ультрафиолетового света и ацисбентную геометрию при воздействии видимого излучения. Этот метод ученые позаимствовали у клеточных мембран с чувствительными к стимулам каналами для саморегуляции проницаемости и селективности.

Исследователи использовали производные азобензола, имеющие по одной реакционной группе на каждом конце, в качестве линкеров для соединения больших гибких циклических молекул, называемых цикленами. Ученые растворяли производные азобензола в смеси дихлорметан-гексан. Затем исследователи готовили раствор циклена и позволяли производным азобензола вступать в реакцию на границе раздела вода-органический растворитель. В результате образовывалась мембрана, которая по итогам испытаний показала уникальную оригамиподобную структуру, которую можно складывать и разворачивать с помощью ультрафиолетового и видимого света.

Контролируя конформацию азобензола с помощью света, ученые смогли удаленно манипулировать размером пор мембраны на молекулярном уровне и, следовательно, настраивать проницаемость и селективность мембраны по отношению к различным растворителям и красителям. По словам исследователей, воздействие ультрафиолетового света переводит «ворота» в закрытое состояние и уменьшает размер пор, что может повысить селективность мембраны. И наоборот, изначальный размер пор, соответствующий «открытому» состоянию, можно получить с помощью воздействия видимого света.

**Из паучьего шелка создали линзы.** Паучий шелк давно используется в медицине, потому что он прочнее синтетических волокон, не токсичен и не вреден для живых клеток. Исследователи предложили новый способ применения паучьего шелка. Из него планируют делать линзы для биологических систем визуализации.

Пауки плетут разные типы шелка, с уникальными свойствами и функциями. Один из них – драглайн-шелк, из которого состоит паутина. Его можно назвать отличным оптическим волокном, потому что его показатель преломления равен примерно 1,55 (для сравнения, показатель преломления стекла – около 1,5). Он дает контрастное и яркое изображение, и с ним очень удобно работать.

«Высокие эластичность, вязкость и прочность на растяжение делают драглайн-шелк интересным природным материалом», – отметил Чэн-Ян Лю, один из авторов исследования и профессор Национального университета Янь-мин.

Группа ученых собрала паутину фаланговидного фолькуса, представителя семейства пауков-сенокосцев, обитающего в Европе. Из его крупной ампулярной железы взяли нить, которую превратили в плотное, гладкое и однородное шелковое волокно, а затем налили на него немного воска и смолы. Под их воздействием полотно сформировало купола в местах,

куда попали капли смолы. Затем его поместили в печь, чтобы дать затвердеть. Оказалось, в таком виде его можно будет использовать в качестве оптической линзы.

«Купольная линза с гибкими фотонными нанометрами подойдет для визуализации наноразмерных объектов на различных глубинах в пределах биологической ткани», – сказал Лю.

**Из полимера с памятью формы сделали движущиеся реснички.** Ученые сделали искусственные движущиеся реснички, которые управляются магнитным полем и светом. Они держат форму при сгибании, но, в то же время, их можно заставить застыть во временном положении, из которого они по сигналу сами обратно вернуться в первоначально заданную форму. В основе лежит полимер с памятью формы, в который замешаны магнитные и светопоглощающие компоненты.

Живые организмы для перемещения жидкостей или твердых частиц зачастую используют движущиеся реснички. Это тонкие органеллы, похожие на волоски или ворсинки. Если реснички расположены вдоль какого-то протока или канала, то синхронно сгибаясь и разгибаясь они будут продвигать вдоль него влагу, пищу или отходы. Например, за счет этого очищается дыхательный эпителий человека, где реснички постепенно проталкивают легочную слизь вверх в глотку, в которой она проглатывается.

Если создать искусственные аналоги этих органелл, то их можно будет применять в тех местах, которые слишком узки для размещения полноценных насосов, например для циркуляции воды в тонких трубках. Кроме того, это позволит создавать эффективные микроконвейеры для мелкодисперсных частиц вроде песка и пыли.

Джессика Лиу из Университета Северной Каролины и ее коллеги сделали реснички, которые не только могут двигаться по команде, но и твердо застывать в требуемом положении. Для этого ученые взяли за основу упругий полимер с памятью формы, замешали в него мелкие магнитные частицы на основе железа и светопоглощающие компоненты из золота. Для изготовления ресничек не требуется ни отливка в форме, ни резьба. Плоскую не застывшую заготовку помещают в сильное магнитное поле, и композит вытягивается вдоль его силовых линий, после чего охлаждается и застывает. Длину ворсинок можно варьировать от 500 микрон до трех миллиметров, добавляя в пластик присадки при отливке.

Изготовленными ресничками можно управлять несколькими способами. Для придания постоянной формы их необходимо нагреть до 180 градусов, после чего механически прижать в нужную сторону. После этого реснички можно сгибать или разгибать при помощи магнита, причем в обратную сторону они будут возвращаться за счет сил упругости. Если в согнутом состоянии их освещать светодиодом в течение примерно четырех минут, то полимер слегка нагреется, размякнет и застынет в новой форме.

Однако, используемый пластик обладает памятью формы. Материалы такого типа могут запоминать несколько состояний, которые переключаются при помощи триггеров: нагрева, магнитного поля или химического воздействия. Триггером для выбранного полимера является повышение температуры, и при нагревании до примерно 80 градусов он стремится восстановить форму, которая была задана при 180 градусах, чему при выключенном магните ничего не мешает.

За счет этого потенциально будет возможным не только перемещение материалов по высланному ресничками каналу, но и, например, локализация этого перемещения. Предположим, базовая форма всех ворсинок – согнутая, и для их выпрямления включается магнит. Мы можем на время зафиксировать все реснички в вытянутом положении, взять

узконаправленный светодиод и закрепить их в таком виде в какой-то отдельной точке. После этого попавшие под диод ворсинки будут зафиксированы в крайнем положении, и магнит не будет активировать эту зону.

**Инженеры научились печатать клавиатуру на бумаге.** Ученые из Университета Пердью (США) разработали простой процесс печати, который превращает бумажные листы из записной книжки в клавиатуру, интерфейс музыкального плеера, а также может сделать упаковку для еды интерактивной. Новый метод позволяет сделать бумагу водоотталкивающей за счет покрытия из высокофторированных молекул. Для такой бумаги также не страшны масло и пыль. Это омнифобное покрытие позволяет печатать несколько слоев схем на бумаге. При этом чернила не размазываются между слоями.

Кроме того, у бумажного электронного устройства автономное питание. Ему не требуется никаких внешних аккумуляторов, так как они получают энергию от контакта с пользователем.

Технология совместима с традиционными крупномасштабными процессами печати, поэтому превратить обычный картон или бумагу в интеллектуальную упаковку или интеллектуальный интерфейс можно очень просто и быстро. Авторы работы надеются, что такую «умную» бумагу можно использовать для упаковки пищевых продуктов или посылок: с ее помощью можно проверять, безопасна ли еда для употребления, на ней можно подписывать посылку, лишь проведя пальцем по коробке.

Также «простые листы из записной книжки могут быть преобразованы в интерфейс музыкального проигрывателя, чтобы пользователи могли выбирать песни, воспроизводить их и регулировать громкость», – отмечает Рамзес Мартинес, доцент Школы промышленной инженерии Университета Пердью и Школы биомедицинской инженерии Велдона инженерного колледжа Пердью.

#### **Разработан метод производства графена из мусора.**

Потенциал однослойного материала графена для промышленности сложно переоценить, но пока мы умеем производить его лишь за \$100 000 за тонну в среднем. Американские ученые сообщили о прорыве в этой области.

Благодаря высокой тепло- и электропроводности, невероятной прочности и гибкости графен уже завоевал звание чудо-материала XXI века. Один из основных методов производства одноатомных листов графена – химическое осаждение из паровой фазы, когда источник углерода, обычно это метан, закачивается в камеру и запускает химическую реакцию, в результате которой тонкий слой графена остается на поверхности субстрата.

«Это трудоемкий и дорогой процесс – рыночная цена графена колеблется от \$67 000 до \$200 000 за тонну», – говорит Джеймс Тур, химик из Университета Райса. Он руководит командой ученых, которые разрабатывают новый способ создания чудо-материала из отходов производства.

В основе нового процесса нагрев джоулевым теплом, когда электрический ток проходит через проводящий материал для получения тепла. Если таким образом нагреть любой содержащий углерод материал до 3000 градусов Кельвина (или 2730 °C), он превращается в графеновые хлопья всего за 10 миллисекунд, а неуглеродные компоненты преобразуются в полезные газы.

Наиболее многообещающий аспект этой технологии в том, что для получения графеновых хлопьев сгодится всякий мусор – от банановой кожуры и других пищевых отходов до угля и пластика. А затраты на производство в разы меньше, чем у современных методов.

Сейчас команда Тура занята усовершенствованием технологии производства. В ближайшие два года они рассчитывают довести объемы до 1 кг продукта в день. На первом этапе они будут получать графеновые хлопья из угля.

**Новый вид пластика можно перерабатывать бесконечное количество раз.** Международная группа ученых, возглавляемая лабораторией Университета штата Колорадо, утверждает, что разработала новый тип пластика, который может перерабатываться бесконечно при сохранении изначальных свойств. Материал РВТЛ состоит из химических строительных блоков, называемых бициклическими тиолактонами, и обладает высокими показателями жесткости, прочности и стабильности.

Ежегодно во всем мире производится более 300 млн. тонн пластика, и только небольшая его часть перерабатывается (в США, например, только 10%). Остальные отходы отправляются на свалку, сжигаются или попадают в окружающую среду. Как правило, ученые предлагают два выхода из сложившейся ситуации. Первый вариант – создать экологически чистый пластик для быстрой утилизации. Однако на данный момент химикам не удалось вывести коммерчески жизнеспособный материал, который сможет эффективно заменить пластмассу в производстве, поэтому существует альтернативный подход – переработка. Этот вариант и использовала команда ученых под руководством профессора Юджина Чена.

Новый материал РВТЛ может быть легко переработан путем простого нагрева до 100°C в присутствии химического катализатора в течение 24 часов. Под воздействием высоких температур пластик полностью разбивается на исходные строительные блоки, которые затем могут быть повторно собраны в точно такой же высококачественный РВТЛ. Но у инновационного материала есть и слабые стороны.

«Главная проблема заключается в том, что РВТЛ можно разбить и преобразовать таким образом, только если он находится в исходном составе. Это означает, что его необходимо отделить от других типов пластика, когда она находится в пластиковых отходах, а потом уже переработать», — объяснил автор исследования Юджин Чен.

Ученые не считают недостаток РВТЛ критически важным, поскольку этот вид пластика обладает всеми необходимыми свойствами, которые требуются для современного производства. Материал может быть использован для изготовления пластиковых контейнеров, спортивного оборудования, автомобильных запчастей, строительных материалов и других продуктов.

**Российские ученые создали самый жаропрочный материал в мире.** Активное развитие аэрокосмической отрасли предъявляет все более серьезные требования к летательным аппаратам: они должны быть быстрыми, износостойкими, должны снижаться затраты на производство и обслуживание. Многие ведущие космические агентства (НАСА, ЕКА (Европа), а также агентства Японии, Китая и Индии) ведут активную разработку таких летательных аппаратов многократного пользования – воздушно-космических самолетов (ВКС), применение которых позволит существенно снизить стоимость доставки людей и грузов на орбиту, а также сократить временные интервалы между полетами. С учетом такого количества требований к производительности аппаратов, требуется серьезно совершенствовать качество используемых в них материалов.

Группа ученых НИТУ «МИСиС» разработала керамический материал с самой высокой температурой плавления среди всех известных на данный момент соединений. Благодаря уникальному сочетанию физических, механических и термических свойств, материал перспективен для использования в наиболее теплонагруженных узлах



летательных аппаратов – носовых обтекателей, воздушно-реактивных двигателях и острых передних кромках крыльев, работающих при температурах выше 2000 °С.

«В настоящее время достигнуты значительные результаты в разработке ВКС. Например, уменьшение радиуса скругления острых передних кромок крыльев до нескольких сантиметров приводит к значительному увеличению подъёмной силы и маневренности, а также уменьшает аэродинамическое сопротивление. Однако при выходе из атмосферы и повторном входе в нее, на поверхности крыльев ВКС могут наблюдаться температуры порядка 2000 °С, а на самом краю крыльев – 4000 °С. Поэтому, когда речь заходит о подобных летательных аппаратах, возникает вопрос, связанный с созданием и разработкой новых материалов, способных работать при столь высоких температурах», – комментирует директор научно-исследовательского центра «Конструкционные керамические наноматериалы» НИТУ «МИСиС» Дмитрий Московских.

В ходе последних разработок задачей ученых Центра было создание материал с рекордно высокой температурой плавления и высокими механическими свойствами. В качестве кандидата была выбрана тройная система гафний-углерод-азот – карбонитрид гафния (Hf-C-N), так как ранее учеными из университета Брауна (США) методом молекулярной динамики было предсказано, что карбонитрид гафния будет обладать высокой теплопроводностью и стойкостью к окислению, а также самой высокой температурой плавления среди всех известных соединений (примерно 4200 °С).

При помощи метода самораспространяющегося высокотемпературного синтеза ученым НИТУ «МИСиС» удалось получить материал  $\text{HfC}_{0.5}\text{N}_{0.35}$ , (карбонитрид гафния) близкий к теоретическому составу, с высокой твердостью 21.3 ГПа, которая не уступает другим новым перспективным материалам, таким как  $\text{ZrB}_2/\text{SiC}$  (диборид циркония-карбид кремния) (20.9 ГПа) и  $\text{HfB}_2/\text{SiC}/\text{TaSi}_2$  (диборид гафния-карбид кремния-диселенид тантала) (18.1 ГПа).

«Трудно измерить температуру плавления материала, когда она превышает 4000 °С, – комментирует аспирант Вероника Буйневич, тема исследования которой «Получение сверхвысокотемпературной керамики на основе карбонитрида гафния для эксплуатации в экстремальных условиях». – Поэтому нами было принято решение сравнить температуры плавления синтезированного соединения и исходного «рекордсмена» – карбида гафния. Для этого мы размещали спрессованные образцы HfC и HfCN на графитовой пластине, имеющей форму гантели, сверху накрывали аналогичной пластиной, чтобы избежать тепловых потерь».

Полученный «сэндвич» ученые подключали к мощному аккумулятору при помощи молибденовых электродов. Все испытания проводили в глубоком вакууме. Так как сечение у графитовых пластин разное, то максимальная температура была достигнута в самой узкой ее части. Результаты одновременного нагрева нового материала, карбонитрида и карбида гафния показали, что карбонитрид обладает более высокой температурой плавления, чем карбид гафния.

**Новый тип связи с атомом углерода смог устранить отвратительный запах изоцианидов.** Химики Санкт-Петербургского государственного университета разработали метод устранения отвратительного запаха такого важного с практической точки зрения класса органических соединений, как изоцианиды. Предложенный подход позволяет достичь более удобного и безопасного хранения этих веществ, при этом сохраняя возможность их последующего использования для получения различных фармакологических препаратов и функциональных материалов.

Изоцианиды являются чрезвычайно востребованным классом органических соединений благодаря широчайшему спектру их химических превращений. В результате реакций изоцианидов получают различные фармакологические препараты, полимерные материалы, катализаторы и люминофоры. Однако широкое применение изоцианидов в химии и химической промышленности ограничивается их отвратительным запахом, который исследователи характеризовали как «ошеломляющий», «ужасный» и даже «убийственный». А Лука Турин, один из ведущих специалистов в химии душистых веществ, назвал изоцианиды «Годзиллой в мире запахов». Этот запах настолько ужасен, что в США было запатентовано применение в целом малотоксичных изоцианидов в качестве нелетального химического оружия.

Исследуя изоцианиды, химики СПбГУ открыли способность этих соединений образовывать ассоциаты с молекулами некоторых органических соединений, содержащих иод. В этих ассоциатах компоненты связаны за счет нековалентных, так называемых галогенных связей. Последние по своей природе напоминают водородные связи, за счет которых формируется спираль ДНК.

«Образование галогенной связи с атомом углерода само по себе неожиданное открытие. Наиболее же значимым положительным эффектом образования такой связи оказалось существенное уменьшение крайне неприятного запаха изоцианидов в их ассоциатах. Количественные исследования, проведенные с помощью метода хроматомасспектрометрии, свидетельствуют об уменьшении концентрации изоцианида в воздухе (и соответственно, его запаха) почти до 50 раз. На практике этот результат означает, что для работы с изоцианидами в виде их ассоциатов больше не требуется вытяжной шкаф и специальные меры предосторожности, а работать с ассоциатами можно просто на обычном химическом рабочем столе. Это значительно облегчает работу химика», – рассказывает первый автор статьи, ассистент Института химии СПбГУ Александр Михердов.

В перспективе полученные аддукты изоцианидов могут стать более удобной альтернативой обычным «пахучим» изоцианидам, поскольку хранить их можно будет без специальных мер предосторожности. При этом сохраняется возможность последующего использования данных соединений для получения практически значимых химических соединений и материалов.

**Ученые создали из микроволновой печи реактор. Так они получили новые материалы.** Микроволновые печи распространены на кухнях в домах гораздо чаще, чем в лабораториях. В 2015 году, когда Риджа Джаян была новым профессором Университета Карнеги-Меллона, она заинтересовалась идеей использования микроволн для выращивания материалов. Вместе с другими исследователями ученая продемонстрировала, что микроволновое излучение способствует температурной кристаллизации и росту керамических оксидов. Было непонятно, как именно это делают микроволны, и эта загадка вдохновила Джаян на реинжиниринг микроволновой печи за \$30, чтобы она могла исследовать динамические эффекты микроволнового излучения на рост материалов.

Сегодня Джаян, которая является доцентом кафедры машиностроения, совершила прорыв в нашем понимании того, как микроволны влияют на химию материалов. Она и ее ученик Натан Накамура подвергли оксид олова (керамику) микроволновому излучению с частотой 2,45 ГГц и выяснили, как отслеживать (in situ) структурные изменения атома по мере их возникновения. В итоге ученые продемонстрировали, что микроволны влияют на кислородную подрешетку оксида олова через искажения, вносимые в локальную атомную

структуру. Такие искажения не возникают при синтезе обычных материалов, где энергия непосредственно применяется в виде тепла.

В отличие от предыдущих исследователей, которые страдали от невозможности отслеживать структурные изменения во время применения микроволн, Джаян разработала новые инструменты для изучения этих динамических, управляемых полем изменений в локальной атомной структуре. Она создала специально разработанный микроволновый реактор, обеспечивающий синхротронное рассеяние рентгеновских лучей на месте. Выявив динамику того, как микроволны влияют на конкретные химические связи во время синтеза, Джаян закладывает основу для создания керамических материалов с новыми электронными, тепловыми и механическими свойствами.

«Как только мы узнаем динамику, то сможем использовать эти знания для изготовления материалов, далеких от равновесия, а также для разработки новых энергоэффективных процессов для существующих материалов, таких как трехмерная печать керамики. Коммерциализация аддитивного производства металлов и пластмасс широко распространена, но этого нельзя сказать о керамических материалах. Трехмерная печать керамики может продвинуть вперед отрасли, начиная от здравоохранения. Представьте себе искусственные кости и зубные имплантаты, промышленные инструменты и электронику. Керамика способна выдерживать высокие температуры, в отличие от металлов. Однако интеграция керамических материалов с современными технологиями трехмерной печати затруднена, потому что керамика хрупкая, требуются сверхвысокие температуры, и мы не понимаем, как контролировать их свойства в процессе печати изделий», – говорит Риджа Джаян, профессор Университета Карнеги-Меллона.

Выводы Джаян были получены в результате нетрадиционных экспериментов, в которых использовалась комбинация инструментов. Она использовала анализ функции распределения пар рентгеновских лучей (PDF), чтобы предоставить в реальном времени структурную информацию об оксиде олова, когда он подвергался воздействию микроволнового излучения. Ученая сравнила эти результаты с оксидом олова, который был синтезирован без воздействия электромагнитного поля. Сравнение показало, что микроволны влияют на структуру атомного масштаба, нарушая кислородную подрешетку.

«Мы были первыми, кто доказал, что микроволны создают такие локальные взаимодействия, разработав метод, позволяющий наблюдать за ними вживую во время химической реакции», о – поясняет Джаян.

Эти эксперименты было чрезвычайно сложно провести, и для них требовался специальный микроволновый реактор. Он был разработан в сотрудничестве с Gerling Applied Engineering, а эксперименты проводились в Брукхейвенской национальной лаборатории (BNL) Министерства энергетики США.

«Еще один вывод из этого исследования заключается в том, что микроволны могут делать больше, чем просто нагрев. Они могут иметь нетепловой эффект, который может изменять структуру материалов, как мозаика», – говорит Джаян.

Основываясь на этой концепции, она исследует, как использовать микроволны для создания новых материалов.

**Проведены наблюдения необычных свойств кристалла.** Ученые из МФТИ совместно с коллегами из УрФУ объединили оптический и акустический подходы и обнаружили, что добавление титана в гексаферрит бария позволяет создать особую подструктуру в кристаллической решетке. Новый материал может быть использован для создания сверхбыстрой компьютерной памяти.

Мультиферроики – это материалы, обладающие одновременно несколькими упорядочениями. Например, они могут одновременно быть сегнетоэлектриками (ферроэлектриками) и ферромагнетиками.

Исследователи изучают фундаментальные свойства мультиферроиков, чтобы получать материалы с заданными свойствами или изменять эти свойства направленным образом. Мультиферроики находят применение в технологиях сверхбыстрой магнитной памяти, терагерцовой (с передачей данных за триллионные доли секунды) телекоммуникации или антирадарных покрытиях.

Объединив оптический (терагерцовую спектроскопию) и акустический (исследование поглощения и скорости ультразвука) экспериментальные методы с целью поподробнее «рассмотреть» гексаферрит бария с примесью титана, ученые смогли наблюдать интересные особенности в поведении материала.

«Оптика и акустика – как зрение и слух, дополняя и при этом не повторяя друг друга, вместе позволяют получить наиболее полную информацию об исследуемом объекте. И если при исследованиях двумя принципиально различными методиками при одних и тех же температурах наблюдаются некие эффекты, это значит, что что-то происходит в образце на микроскопическом уровне, и надо найти механизм, из-за которого эти эффекты проявляются», – говорит Людмила Алябьева, руководитель направления «Мультиферроики», старший научный сотрудник лаборатории терагерцовой спектроскопии МФТИ.

Ученые нашли объяснение необычному поведению одновременно оптических и акустических свойств исследуемого материала.

Оказалось, что при добавлении титана в гексаферрите бария изменяется характер подрешетки ионов железа. Атомы примеси заставляют часть атомов железа менять свою степень окисления и образовывать подструктуру в основной решетке – так называемую ян-теллеровскую подрешетку.

Когда в основную решетку кристалла добавляют примеси, новые атомы встраиваются в структуру, заменяя кого-то из прежних «жильцов». При добавлении в гексаферрит бария титан становится на место некоторых атомов железа. При этом атом титана и атом железа находятся в разных валентных состояниях: титан четырехвалентный, а железо трехвалентное. Валентность отражается и на электрическом заряде ионов в кристалле, и на их размере.

«Когда маленький четырехвалентный ион титана замещает трехвалентный ион железа, возникает искажение решетки и нарушается электронейтральность. Электронейтральность должна поддерживаться – это фундаментальное правило. Поэтому часть соседей титана – трехвалентных ионов железа – переходят в двухвалентное состояние, чтобы компенсировать возникший заряд», – добавляет Борис Горшунов, заведующий лабораторией терагерцовой спектроскопии МФТИ.

Изменения в структуре обуславливают необычное поведение оптических и акустических свойств, замеченное исследователями.

«Мы впервые обнаружили новый механизм формирования подрешетки ян-теллеровских центров: ее образуют не атомы примеси, как это обычно происходит, а часть атомов исходного кристалла», – комментирует Владимир Гудков, профессор Уральского федерального университета.

Наличие подрешетки Яна-Теллера ведет к появлению необычных свойств кристалла. Например, возникает возможность воздействовать на магнитные подсистемы с помощью

электрического поля (скажем, с помощью Т-лучей перемангничивать биты сверхбыстрой компьютерной памяти).

**Появились программируемые синтетические материалы.** Ученые из США научились программировать синтетические материалы. С их помощью врачи, например, смогут указать лекарству в каком порядке ему нужно расщепляться в организме человека.

Исследователи из Калифорнийского университета в Беркли и Рурского университета в Бохуме показали, как атомно-зондовую томографию можно использовать для считывания сложного расположения ионов металлов в многомерных металлоорганических каркасах. Эти каркасы представляют собой органические единицы для формирования определенной структуры. С помощью этого подхода исследователи, например, смогут считывать форму и программировать материалы на определенные действия.

Для кодирования информации с использованием последовательности металлов нужно иметь возможность считывать форму металлической схемы. Исследователи впервые использовали атомно-зондовую томографию и смогли спроектировать металлоорганическую структуру (МОС) с комбинациями кобальта, кадмия, свинца и марганца, а затем создали из нее полноценный материал.

В будущем МОС могли бы стать основой программируемой химической молекулой. Например, их можно запрограммировать для введения в организм активного фармацевтического ингредиента и указать мишень из инфицированных клеток. Врачи также смогли бы заранее определить какие составляющие лекарства должны освоиться в организме в первую очередь.

«В долгосрочной перспективе такие структуры с запрограммированными атомными последовательностями могут полностью изменить наше представление о синтезе материалов, – отметили исследователи. – Синтетические материалы могут выйти на совершенно новый уровень точности, о котором раньше нельзя было и подумать».

*Хотя нельзя считать, что в разработке и создании приведенных в обзоре материалов принимал участие ИИ «в чистом виде», но можно утверждать, что частички ИИ в них есть – либо в формате привлечения достижений других исследовательских групп, работавших с ИИ, либо посредством использования методик, где ИИ является составным элементом, либо в виде оборудования и приборов, произведенных с участием ИИ. Так или иначе, но ИИ уже постоянно присутствует в научных исследованиях и разработках, причем так, что этого порой не замечают и сами ученые с инженерами.*