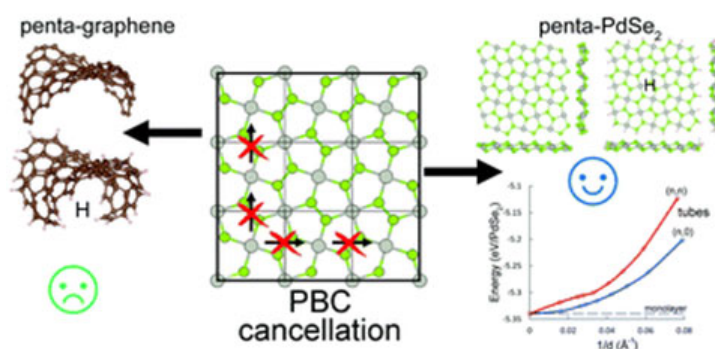


Учёные придумали способ определить «жизнеспособность» предсказанных 2D-материалов

Международная группа исследователей из России, Швеции и Южной Кореи предложила новый способ проверки структурной стабильности предсказанных 2D-материалов. В результате апробации был выявлен ряд ошибочно предложенных ранее материалов. Учёные полагают, что применение нового метода позволит в будущем избежать ошибок при разработке двумерных наноматериалов, пользующихся повышенным спросом в современном мире. Статья [опубликована](#) в международном журнале Physical Chemistry Chemical Physics.



Возможность существования двумерных структур, представляющих собой тончайшие плёнки, состоящие из одного слоя кристаллической решётки атомов, широко обсуждалась с середины прошлого века. Учёные вели жаркие дискуссии в течение нескольких десятилетий, пока такая возможность не была доказана теоретическими выводами, а позже подтверждена экспериментально синтезом графена — кристаллического углерода толщиной в один атом. С тех пор интерес к двумерным материалам, обладающим неожиданными свойствами — высокой прочностью (в сотни раз прочнее металла), лёгкостью, теплопроводностью, значительно вырос, и на сегодняшний день число экспериментально полученных 2D-материалов исчисляется десятками.

Стоит отметить, что вначале большинство материалов открывалось преимущественно методом проб и ошибок. Однако с появлением достаточных компьютерных мощностей и теоретических методов предсказания материалы начали открывать ещё до их синтеза. Современные высокопроизводительные алгоритмы и методы могут использоваться для массового сканирования новых 2D-материалов среди уже известных соединений. Также с их помощью можно создавать ранее неизвестные материалы с заданными свойствами. Однако для того, чтобы такие предсказанные материалы были востребованными для производства и имели в дальнейшем перспективы воплощения в реальность, необходимо обязательно просчитать их стабильность.

«Мы обнаружили, что существующие и широко используемые методы проверки стабильности теоретически открытых двумерных материалов имеют один серьёзный недостаток, который позволяет обходить общепринятые критерии и, по сути, в некоторых случаях приводит к ложному предсказанию устойчивости 2D-материала. Проще говоря, такие материалы просто не должны существовать, шанса получить их экспериментально практически нет, а открытие подобных материалов — всего лишь ошибка используемого метода», — сообщил инженер-исследователь лаборатории фундаментальных научных исследований Департамента науки и инновационной деятельности СФУ **Артём Куклин**.



Учёный пояснил, что основным недостатком ныне широко используемого метода является модель представления материала.

«При моделировании исследователи используют некий условный материал, представляющий собой бесконечно повторяющийся мотив, состоящий из так

называемых элементарных ячеек — минимальных фрагментов структуры. Это похоже на клетки, повторяющиеся на тетрадном листе. При этом информация об одной „клетке“ даёт информацию обо всём „листе“. Модель предполагает, что все эти „клеточки“ жёстко связаны между собой и „согнуть“ их вдоль этой связи нельзя. То есть, мы заведомо получаем идеально ровный бесконечный „лист“, что, разумеется, слабо соответствует действительности», — рассказал **Артём Куклин**.

В качестве дополнительного критерия стабильности двумерных наноматериалов авторы исследования предлагают рассматривать не бесконечную модель материала, а её часть конечного размера, в которой нет жёстких ограничений связи между отдельными фрагментами структуры. Если при этих условиях материал остаётся таким же, как и был в периодической модели, то в нём отсутствуют внутренние напряжения. Если же материал значительно исказится (например, свернётся), то внутреннее напряжение в такой структуре станет маркером нестабильности, а значит, и сомнительной «реализуемости» этого материала на практике.

«Используя предложенный метод, наша исследовательская группа продемонстрировала структурную устойчивость недавно синтезированного 2D-материала диселенида палладия (PdSe_2) и неустойчивость нескольких ранее предложенных двумерных материалов с похожей структурой. Мы считаем такой подход достаточно эффективным, чтобы теоретически изучать материалы, представляющие интерес для технологий будущего. Кстати, в качестве ещё одного критерия оценки отсутствия внутренних напряжений в 2D-материале мы предложили изучать его стабильность относительно нанотрубок из того же материала. При этом двумерный материал должен быть стабильнее нанотрубок. Мы надеемся, что научное сообщество обратит внимание на обозначенную проблему и улучшит существующие алгоритмы, чтобы избежать подобных ошибок в будущем», — подвёл итоги исследователь.

Исследование было поддержано Российским научным фондом в рамках проекта 18-13-00363.

[Пресс-служба СФУ](#), 22 мая 2020 г.

© Сибирский федеральный университет. Редакция сайта: +7 (391) 246-98-60, info@sfu-kras.ru.

Адрес страницы: <https://news.sfu-kras.ru/node/23201>