

В этом выпуске:

## ГРАФЕН

### *Новое бактерицидное покрытие из графена с лишайниками*

Для предотвращения развития инфекций необходимо защищать от бактерий поверхности различного медицинского оборудования, инструментов и, конечно, имплантатов, которые долго находятся в контакте с телом человека. Задача осложняется тем, что опасные бактерии, например, золотистый стафилококк *Staphylococcus aureus*, быстро формируют штаммы, устойчивые к применяемым антибиотикам. Исследователи ищут новые подходы – объединяют антибиотики с золотыми наночастицами, которые при лазерном облучении обеспечивают тепловой эффект [1], разрабатывают биомиметические наноструктурные поверхности с механо-бактерицидной активностью [2]. Большой потенциал для борьбы с бактериями имеет графен – химически инертный, термостабильный, прочный, биосовместимый материал. Он может не только служить носителем противомикробного препарата, из него можно сформировать бактерицидные покрытия. Правда, для этого чешуйки графена должны быть ориентированы вертикально или под таким углом, чтобы острые края разрушали клетки попавших на них бактерий. Это довольно сложно реализовать.

Ученые из Швеции и Дании разработали на основе графена новые покрытия, которые обеспечивают длительную защиту от бактерий и от образования биопленки, что особенно важно для биомедицины [3]. В помощь графену они использовали лишайники. Лишайники – удивительный живой организм, а точнее, симбиоз двух организмов, грибов и микроводорослей. В процессе метаболизма лишайников образуются специфические лишайниковые вещества, которые не встречаются в других группах организмов. Особый интерес представляет усниновая кислота (usnic acid, далее UA), обнаруженная в лишайнике рода *Usnea* и ряде других. Различные исследования выявили высокую антибактериальную активность UA, а также антиоксидантные и даже противоопухолевые свойства [4].

Для создания покрытий авторы [3] использовали простой способ. Они смешали растворы графеновых чешуек и усниновой кислоты (1:1 в молярном соотношении), а затем провели ультразвуковую обработку для получения однородной дисперсии. Растворы разной концентрации графена с UA (суммарная концентрация 25, 50, 100 и 200 мг/мл), а также контрольный раствор графеновых чешуек без UA (100 мг/мл), капельным методом нанесли на покровные стекла.

И далее ...

## СНОВА К ОСНОВАМ

- 3 Рельсы-рельсы, шпалы-шпалы ... и фононные кристаллы

## ФУЛЛЕРЕНА И НАНОТРУБКИ

- 5 Фуллерены-курьеры для таргетной терапии

## СПИНТРОНИКА

- 6 Поляризация по спину в киральных кристаллах или винтовых лестницах для электронов

## ТОРЖЕСТВО

- 7 Михаил Валентинович Ковальчук отмечает 75-летний юбилей

## КОНФЕРЕНЦИИ

- 8 XXXIX Международная зимняя школа физиков-теоретиков “Коуровка”, 20 - 26 февраля 2022 г., г. Екатеринбург, Россия

Покрyтия высушили и дополнительно прогре- ли при 60°C. На SEM изображении видны

кристаллики UA, закрепившиеся на графене (рис. 1)

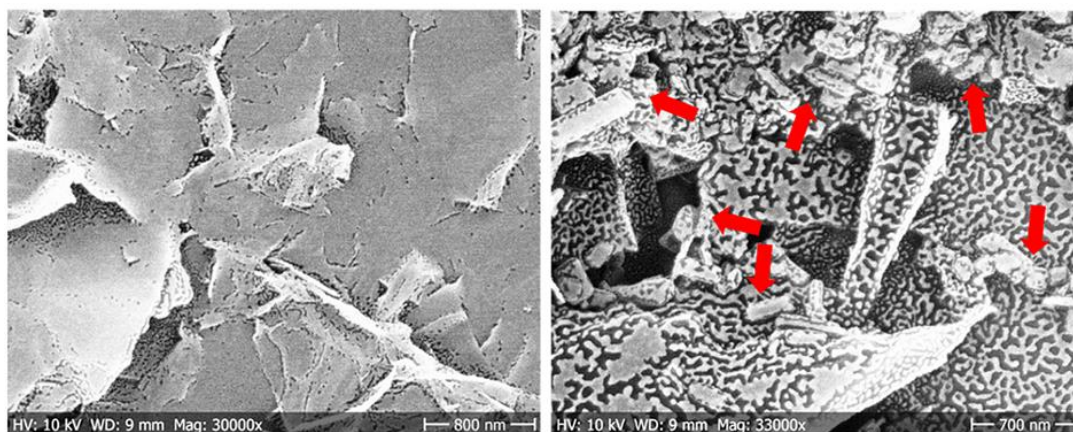


Рис. 1. SEM изображения поверхности, покрытой графеновыми чешуйками (слева) и графеновыми чешуйками с UA (справа), концентрация 100 мг/мл. Красные стрелки указывают на кристаллики UA, прикрепившиеся к графену.

Для длительной защиты очень важно стабильное выделение антибактериального препарата. Исследователи выяснили, что в первый день из покрытия, полученного при концентрации 200 мг/мл, в буферный раствор выделяется 40 мг UA, а затем в течение 6 дней около 20-30 мг в день. Это происходит благодаря наличию многих слоев графеновых чешуек, каждый из которых постепенно отдает в окружающую среду кристаллики UA.

Далее авторы [3] проверили эффективность полученных покрытий в отношении двух опасных стафилококков, золотистого *S. aureus* и эпидермального *S. Epidermidis*, которые часто образуют биопленки на катетерах, имплантатах и инфицируют окружающие ткани. На рис. 2 показаны результаты для *S. Aureus* (для *S. Epidermidis* они аналогичные). Биопленки выращивали в течение 24 часов на контрольной поверхности без покрытия и на поверхностях с покрытиями из графена (Gr) и графена с UA (Gr+UA). На контрольном образце и образце с графеновым покрытием без UA сформировались достаточно плотные биопленки. Всего несколько бактериальных клеток обнаружено на поверхностях, покрытых графеновыми чешуйками с UA при концентрации 100-200 мг/мл. Дальнейшие эксперименты показали, что защитный эффект покрытий сохраняется и через 96 часов (рис. 3).

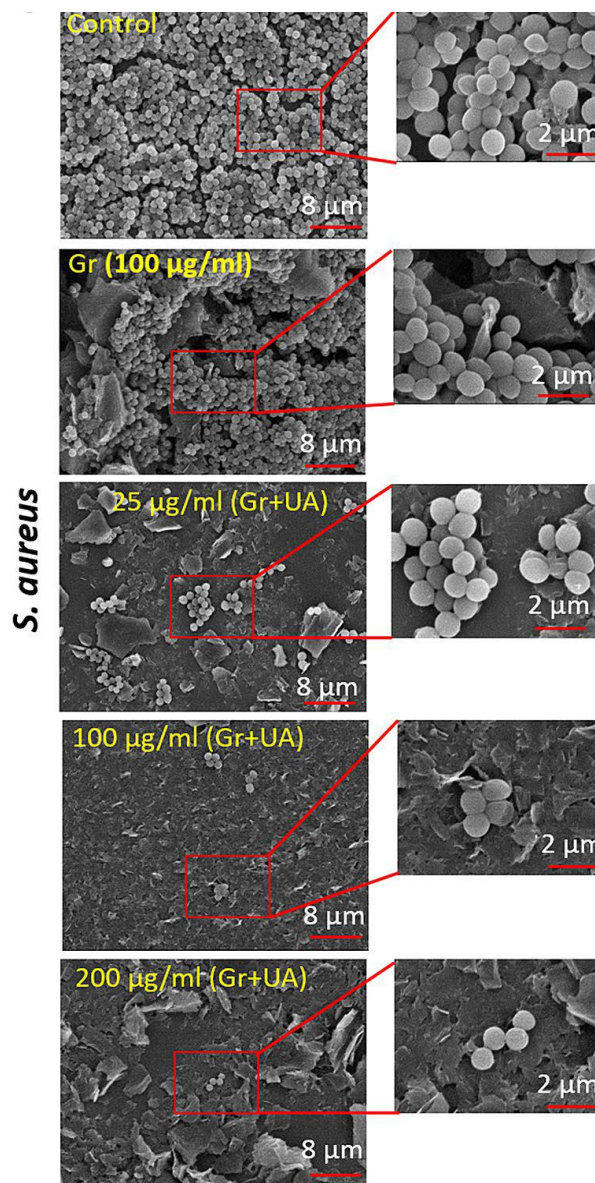
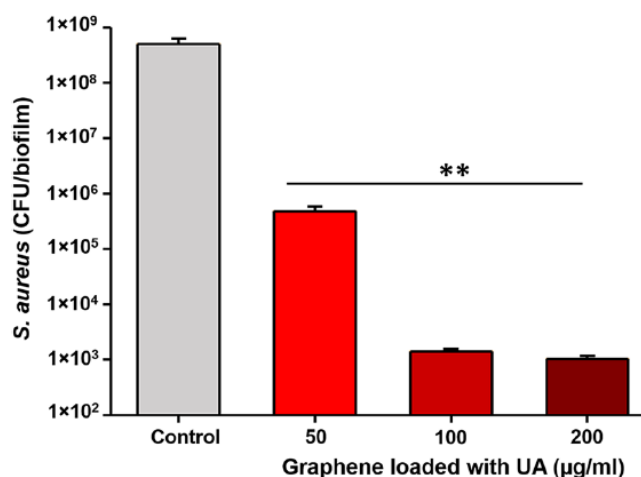


Рис. 2. SEM изображения биопленок *S. Aureus* на контрольной поверхности и на поверхностях с покрытиями из графена и графена с UA разной концентрации.



Конечно, нельзя напрямую перенести результаты, полученные *in vitro*, на реальную ситуацию *in vivo*. Однако можно предположить, что покрытия, которые снижают рост биопленки в 100 000 раз даже через 96 часов, обеспечат эффективную защиту *in vivo*, тем более, что в организме человека против бактерий работает еще и иммунная система.

(a)



(b)

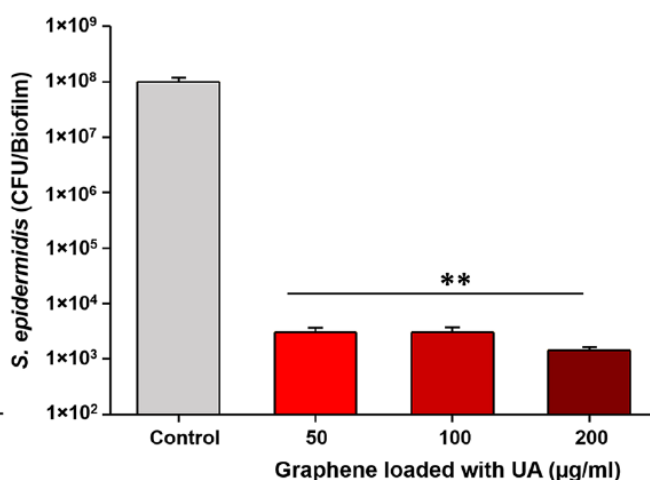


Рис. 3. Жизнеспособность бактерий *S. Aureus* (a) и *S. Epidermidis* (b) в биопленках на контрольной поверхности и на покрытиях с разной концентрацией Gr+UA через 96 часов.

В целом результаты, полученные авторами [3], убедительно показали, что предложенные покрытия обладают свойствами, необходимыми для длительной эффективной защиты биомедицинских поверхностей от биопленок. Во-первых, кристаллики UA успешно внедрены в графеновый материал. Во-вторых, наблюдается постоянное выделение UA. В-третьих, непрерывное выделение UA обеспечивает подавление роста биопленки не только в первый день, когда из покрытия выходит максимальное ко-

личество UA, но и в последующие дни, когда это количество существенно меньше.

О. Алексеева

1. ПерсТ 23, вып. 18, с.4 (2016).
2. ПерсТ 28, вып. 1/2, с.1 (2021).
3. S.Pandit et al., Sci. Rep. 11, 9956 (2021).
4. O.A.Luzina, N.F.Salakhutdinov, Expert Opin. Ther. Patents 28, 477 (2018).

## СНОВА К ОСНОВАМ

### Рельсы-рельсы, шпалы-шпалы ... и фононные кристаллы

Механизм образования запрещенных зон в периодических структурах уже несколько десятилетий является источником идей для управления волнами самой разной природы – оптическими, акустическими, спиновыми и другими. Эти идеи проникли даже в такую, казалось бы, далёкую область, как железнодорожный транспорт. Вопрос подавления вибраций рельсов является актуальной областью исследований в настоящее время, в связи с развитием высокоскоростного железнодорожного движения. Один из вариантов подавления вибраций – использование инерционных демпферов. В основе действия таких демпферов – передача колебаний от основной системы к вторичной, которая представляет собой дополнительную массу, и рассеяние энергии вторичной системой. Также существуют шпалы-демпферы с подавлением колебаний за счет упругих включений внутри самой шпалы. Авторы статьи [1] задались вопросом, можно ли использовать механизм запрещенных зон для подавления вибраций и шума от поездов. Рельсы, лежащие на шпалах, можно рассматривать как периодическую структуру, выделить в ней элементарную ячейку, использовать теорему Блоха и рассчитать дисперсионные соотношения, как это делается во всех стандартных случаях одномерных периодических структур.

Исследователи разработали эквивалентную схему для системы рельсов, шпал и креплений (рис. 1), записали и решили волновое уравнение для двух типов упругих волн – продольной и поперечной. Решение уравнений с численными параметрами, характерными для стандартных рельсов, показало, что система обладает двумя запрещенными зонами – ниже 150 Гц и в окне 1280–1360 Гц. На рис. 2 показаны частотные зависимости действительной и мнимой части волнового числа, а также коэффициента усиления для изгибной волны. Для низкоча-

ПерсТ, 2021, том 28, выпуск 17/18

стотной запрещенной зоны имеет место сильное подавление волн, для высокочастотной

ослабление не столь существенно. Кроме того, присутствуют пики – частоты, на которых вибрации усиливаются.

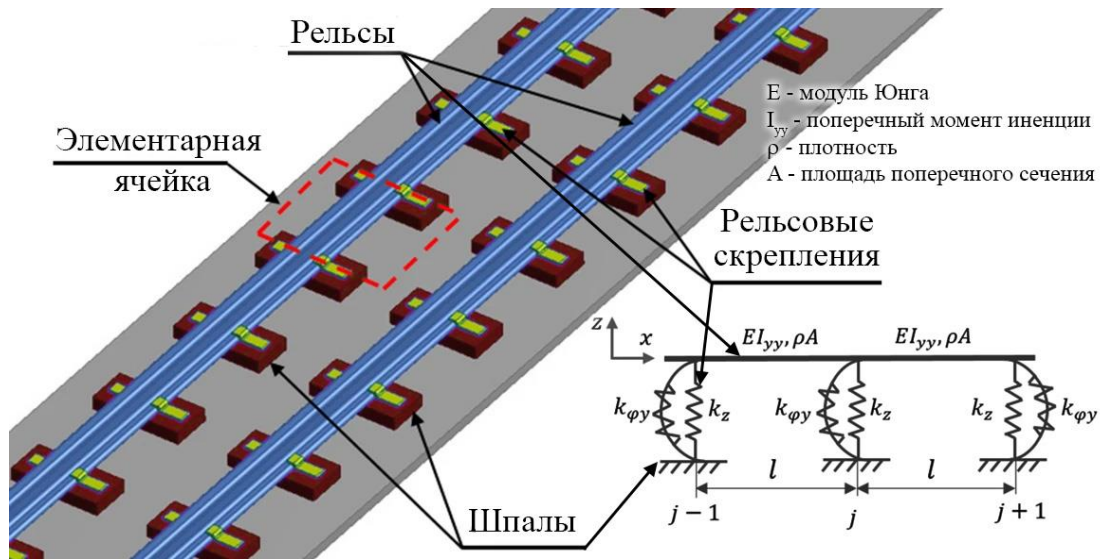


Рис. 1. Модельная система – железная дорога, и эквивалентная схема для нее.

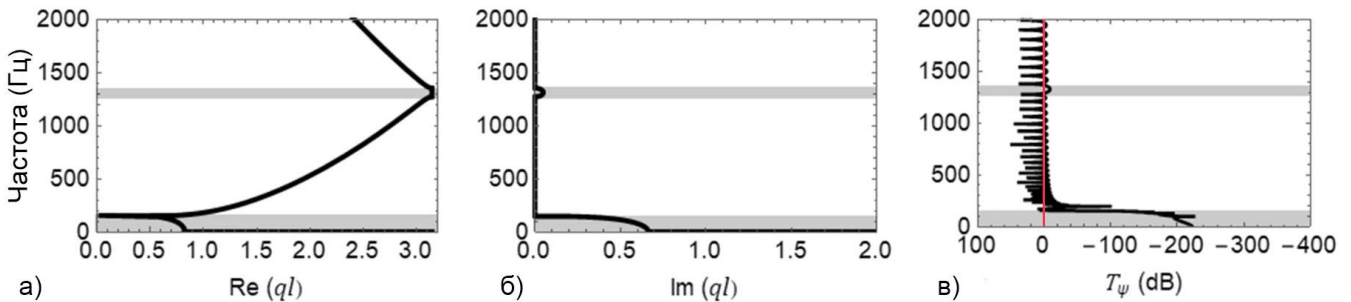


Рис. 2. Дисперсионные кривые: а - для действительной части волнового числа; б - для мнимой части волнового числа; в - коэффициент усиления изгибной волны.

Для того чтобы подавить вибрацию, наличия запрещенных зон оказалось недостаточно, поэтому необходимо разрабатывать системы дополнительного демпфирования. Авторы предложили два варианта. Во-первых, можно использовать дополнительные массы, упруго прикрепленные к каждому рельсу между шпалами – это будет локализованный, или сосредоточенный демпфер. Во-вторых, в качестве дополнительной массы можно использовать второй рельс – это будет распределенный демпфер. Соответствующие эквивалентные схемы приведены на рис. 3а. Чтобы показать, как ослабляется вибрация, авторы подавали на вход системы гауссовский шум и численно рассчитывали амплитуду выходного шума в системах без демпфирования и с двумя различными вариантами демпфирования (рис. 3б).

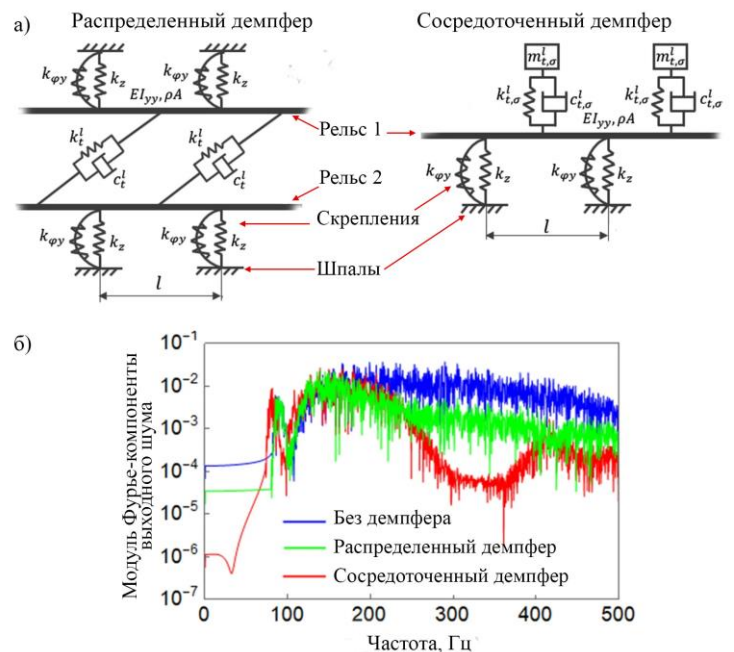


Рис. 3. а - Эквивалентные схемы демпфирования; б - ослабление шума в зависимости от частоты при разных вариантах демпферов.

Видно, что предложенные авторами системы демпфирования подавляют шум, причём сосредоточенные массы работают лучше, но использование второго рельса экономичнее. Хотя эффект запрещённых зон в железнодорожном полотно нельзя использовать напрямую для шумоподавления, тем не менее сама технология расчёта, основанная на свойствах периодических структур, даёт новые возможности для моделирования таких систем и поиска оптимальных вариантов.

З. Пятакова

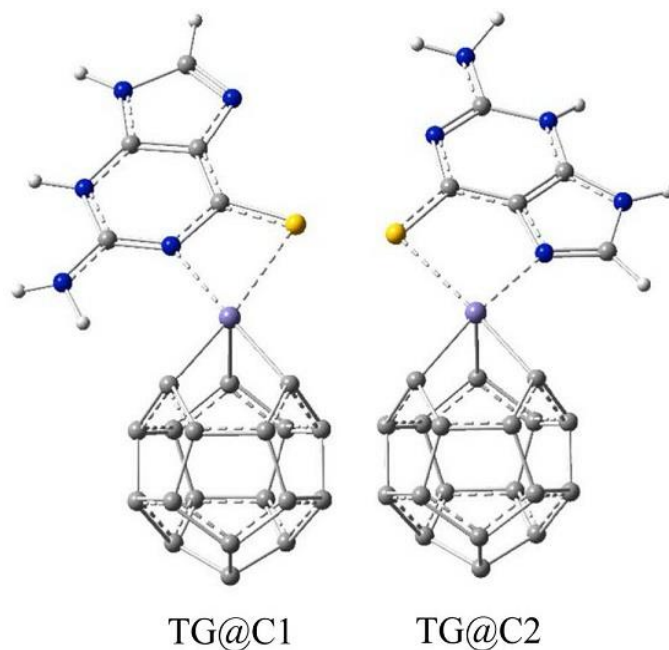
1. M.Iqbal et al., *Sci. Rep.* **11**, 18145 (2021).

<https://doi.org/10.1038/s41598-021-97384-3>

## ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

### Фуллерены-курьеры для таргетной терапии

Идея использовать углеродные фуллерены в качестве основы современных систем доставки лекарственных средств не теряет актуальности. В работе [1] международная группа исследователей постаралась оценить перспективность наименьшего из возможных фуллеренов  $C_{20}$ , допированного железом, для целей таргетной противоопухолевой терапии. Действующим веществом послужила молекула тиогуанина (TG), препарата, обладающего выраженной иммуносупрессивной активностью. Задача, которую ученые перед собой поставили, состояла в понимании особенностей и преимуществ использования легированной железом фуллереновой клетки в роли молекулярного курьера противоракового средства. Для анализа структуры и электронных характеристик комплексов фуллерен-тиогуанин авторы воспользовались теорией функционала плотности. Они проводили расчеты в программе Gaussian с использованием обменно-корреляционного функционала WB97XD и поплковского базиса 6-31+G(d,p). В первую очередь в процессе геометрической оптимизации исследователи установили возможность формирования сразу двух типов молекулярных комплексов TG@C1 и TG@C2 (см. рис.), отличающиеся друг от друга ориентацией лекарства относительно фуллерена. В случае TG@C1 молекула тиогуанина выстраивается шестичленным углеродным кольцом в направлении легированной железом поверхности клетки, а в случае конфигурации TG@C2 – пятичленным кольцом. При этом исследователи установили, что комплекс TG@C2 энергетически более устойчив.



Атомные структуры молекулярных комплексов фуллерен-тиогуанин TG@C1 (слева) и TG@C2 (справа)

Кроме того, дополнительный анализ электронных характеристик и квантово-химических дескрипторов, в том числе НОМО-LUMO щели, химической жесткости и мягкости позволил сделать вывод о сохранении исходных терапевтических свойств TG в составе бимолекулярного комплекса. Таким образом, первоначальная эффективность препарата существенно не снижается. В целом, по совокупности характеристик, в том числе склонности к участию в химических реакциях и устойчивости комплекс TG@C2, по мнению авторов, выглядит предпочтительнее для адресной доставки противоопухолевого вещества. Кроме того, детальный анализ констант квадрупольной связи подтвердил, что электронные характеристики и расположение атомов тиогуанина в системе TG@C2 изменяются слабее, чем в TG@C1. При этом следует отметить, что задача целевого высвобождения лекарственного препарата авторами в работе не затрагивается и требует отдельного решения. Будем ждать экспериментальной верификации результатов компьютерного моделирования.

М. Маслов

1. S.Mahdinia et al., *Comput. Theor. Chem* **1204**, 113401 (2021).



## СПИНТРОНИКА

### Поляризация по спину в хиральных кристаллах или винтовые лестницы для электронов

Говорят, что винтовые лестницы в башнях средневековых замков строились с закруткой по часовой стрелке, чтобы дать преимущество обороняющимся перед наступающими (при этом по умолчанию предполагается, что защитники и нападающие – праворукие). Впрочем, не все историки с этим соглашались, а вот связь хиральности (дословно с греческого, “-рукости”) кристалла с направлением спина электронов, движущихся вдоль винтовых атомных “лестниц” – эффект в физике известный, он получил название хирально-индуцированной селективности по спину (chirality-induced spin selectivity, CISS).

В недавней статье японских ученых [1] на примере двух кристаллов, силицида ниобия  $\text{NbSi}_2$  и силицид тантала  $\text{TaSi}_2$ , с помощью измерений обратного спинового эффекта Холла при комнатной температуре показано, что возникающие в таких кристаллах поляризованные по спину токи характеризуются необычно большими длинами, на которых сохраняется спиновая поляризация – 10 микрон и более, что на два порядка превосходит как длину свободного пробега электронов, так и спиновую диффузионную длину.

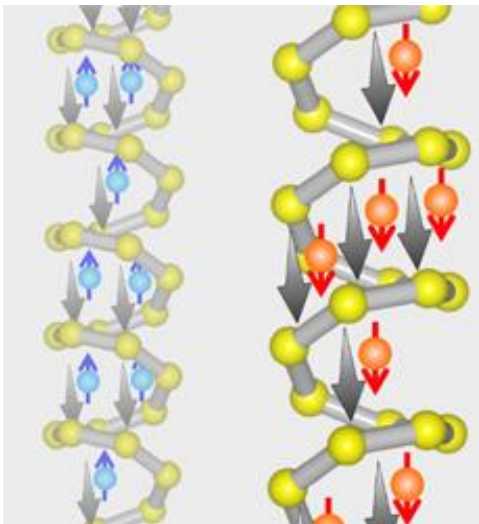


Рис. 1. Хиральная структура кристалла и спиновая поляризация тока: кристаллы  $\text{NbSi}_2$  и  $\text{TaSi}_2$  с различной хиральностью имеют противоположную спиновую поляризацию токов (серыми стрелками показано направление движения электронов, цветными стрелками – направления спинов).

Макроскопические характеристические длины  $\sim 1$  мкм в хиральных материалах наблюдались и ранее той же командой в  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$  [2], и они объясняли это взаимодействием спинов электронов проводимости с локализованными электронными спинами. Поэтому, в этот раз они выбрали немагнитоупорядоченные материалы силицид ниобия  $\text{NbSi}_2$  и силицид тантала  $\text{TaSi}_2$ . К их удивлению, вместо ожидаемого уменьшения расстояния, на котором сохраняется спиновая поляризация, они увидели ее увеличение на порядок. Механизм возникновения спиновой поляризации в этих кристаллах также остается загадкой, судя по тому, что эффект CISS в силициде ниобия с 4d-электронами сильнее, чем в силициде тантала с 5d-электронами, он не связан напрямую со спин-орбитальным взаимодействием.

Несмотря на то, что характеристическая длина в таких кристаллах все-таки меньше, чем в графене и кремнии, хиральные кристаллы выступают одновременно и как спиновые поляризаторы и как проводники спинового тока (и это при комнатных температурах!), что особенно интересно для приложений в спинтронике.

*А. Пятаков*

1. K.Shiota et al., *Phys. Rev. Lett.* **127**, 126602 (2021).
2. A.Inui et al, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 166602 (2020).

## ТОРЖЕСТВО

*Михаил Валентинович Ковальчук отмечает 75-летний юбилей*



Михаил Валентинович Ковальчук - президент НИЦ “Курчатовский институт”, член-корреспондент Российской академии наук - 21 сентября отметил свой 75-летний юбилей. Михаил Валентинович - советский и российский физик, известный специалист в области рентгеновской физики, кристаллографии и нанодиагностики, один из идеологов и организаторов развития нанотехнологий в России. Автор и соавтор более 250 научных работ, а также 13 патентов.

Научный и организаторский талант Михаила Валентиновича раскрылся при создании Курчатова центра синхротронного излучения. М.В. Ковальчук стал его директором-организатором и сосредоточил усилия на создании комплекса исследовательских станций на базе синхротрона “Сибирь-2”, уделяя при этом особое внимание исследованиям нанобиоорганических систем. Он успешно завершил реализацию научного проекта по разработке, созданию и вводу в эксплуатацию комплекса уникального научно-исследовательского оборудования — экспериментальных станций на пучках первого в России специализированного источника синхротронного излучения.

Будущее человечества — это термоядерный синтез. Неиссякаемый источник энергии, представляющий собой рукотворное солнце. Недавно к этому будущему в Курчатове институте сделали еще один шаг, запустили первую за 20 лет термоядерную установку, построенную в России. Токамак, или тороидальная камера с магнитными катушками, способна удерживать внутри плазму температурой в 100 миллионов градусов. И эта установка — новое слово в технологии, созданной советскими учеными.

А еще юбиляр занят преподавательской работой, ведет научно-популярные программы на телевидении, чтобы зажечь в других интерес к жизни. Ведь именно любознательность, убежден Михаил Ковальчук, и есть секрет активного долголетия.

*Поздравляем Михаила Валентиновича с юбилеем, желаем ему крепкого здоровья и дальнейших творческих успехов на благо физической науки!*

## КОНФЕРЕНЦИИ

***XXXIX Международная зимняя школа физиков-теоретиков “Коуровка”, 20 - 26 февраля 2022 г., г. Екатеринбург, Россия***

***Научная программа*** включает следующие направления физики конденсированных сред:

- Магнетизм и сверхпроводимость
- Физика сильно коррелированных и неупорядоченных систем
- Теория фазовых переходов и физика низкоразмерных систем
- Топологические изоляторы и полуметаллы

Зимняя школа физиков-теоретиков “Коуровка” регулярно проводится на Урале с 1961 года. Она была организована по инициативе и при непосредственном участии академика С.В. Вонсовского. В 2022 году школа будет проводиться в тридцать девятый раз.

Организаторами школы являются Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН и Институт электрофизики УрО РАН.

На школе слушателям будут предложены циклы лекций, посвященных наиболее актуальным проблемам теории конденсированного состояния вещества и ряду других вопросов теоретической физики.

Кроме того, участникам школы будет предоставлена возможность выступить на семинарах с устными докладами (отобранными Программным комитетом), а также представить стендовые сообщения.

В работе школы предполагается участие большого числа молодых ученых, а также студентов и аспирантов.

“Коуровка-XXXIX” традиционно будет проводиться в санатории-профилактории “Гранато-



вая бухта”, расположенном в п. Верхняя Сысерть в 50 км от г. Екатеринбурга.

**ВАЖНО:** в связи с ограниченным количеством мест в санатории “Гранатовая бухта” просим Вас зарегистрироваться как можно скорее (тезисы можно будет подгрузить позже).

***Важные даты:***

Регистрация - **30 Ноября 2021 г.**

Подача тезисов - **15 Декабря 2021 г.**

Ранняя оплата оргвзноса - **1 Февраля 2022 г.**

С более подробной информацией можно ознакомиться на сайте школы

<http://kourovka.imp.uran.ru/>.

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

Главный редактор: И.Чугуева, e-mail: [ichugueva@yandex.ru](mailto:ichugueva@yandex.ru)

Научные редакторы К.Кугель, Ю.Метлин

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

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64