

В этом выпуске:

СВЕРХПРОВОДНИКИ

Новый взгляд на электронную структуру безмедного ВТСП BaFe_2As_2

В зависимости от силы межэлектронного взаимодействия все известные сверхпроводники можно условно разделить на два больших класса: “слабокоррелированные” (например, MgB_2) и “сильнокоррелированные” (например, купратные ВТСП). Первые хорошо описываются в рамках простых одночастичных моделей, а механизм сверхпроводимости в них – фононный, тогда как для вторых единого подхода к описанию электронной структуры и механизма спаривания пока не выработано. При расчете электронных характеристик сильнокоррелированных материалов используются различные подходы, включая, например, теорию функционала плотности (density functional theory, DFT), динамическую теорию среднего поля (dynamical mean-field theory, DMFT) и др., каждый из которых имеет свои плюсы и минусы, причем не всегда понятно, какой из этих подходов более адекватно отражает экспериментальную ситуацию.

В безмедных ВТСП на основе железа межэлектронные корреляции тоже значительны (хотя и сильно разнятся в разных семействах), но экспериментальные данные для этих сверхпроводников более противоречивы, чем для купратов: до сих пор предметом дискуссий остаются вопросы о поверхностях Ферми, эффективных массах носителей и пр. В работе [1] (Швейцария, Франция, Япония, Швеция, США) обращается внимание на существенную роль эффектов динамического экранирования кулоновского взаимодействия, которые приводят к частотной зависимости энергии одноцентрового кулоновского отталкивания d -электронов атомов Fe и ранее в полной мере не учитывались. Используя комбинированный метод DFT+DMFT в сочетании с квантовым методом Монте-Карло, авторы [1] на конкретном примере BaFe_2As_2 (соединение типа 122) показали, что эти эффекты не только важны для понимания поведения спектральной функции при больших энергиях (корреляционные сателлиты, наблюдающиеся в экспериментах по фотоэмиссии), но и сильно влияют на низкоэнергетические электронные возбуждения. Так, при близком к оптимальному уровне допирования (число дырок на атом Fe: $x = 0.2$) и $T = 145$ К собственная энергия $\Sigma \sim \omega^\alpha$, где $\alpha = 0.56$, тогда как в ферми-жидкости $\alpha = 1$ (угол наклона прямой $\Sigma(\omega)$ при этом определяет перенормировку массы носителей). Следовательно, теория Ландау не применима к оптимально допированному BaFe_2As_2 . Этим, по-видимому, и объясняется большой разброс величин эффективной массы, определяемых из данных фотоэмиссионной спектроскопии (интерпретация эксперимента основана на концепции квазичастиц Ландау, а их здесь просто нет...). Уменьшение дырочного допирования и его смена на электронное допирование приводит к восстановлению когерентной ферми-жидкости (при этом эффективная масса квазичастиц составляет 2-3 массы свободного электрона), тогда как при увеличении x скорость рассеяния резко возрастает и происходит переход в фазу

И далее ...

- 2 Сосуществование сверхпроводимости и топологического порядка

ГРАФЕН

Лазерный метод выращивания графена

- 3 Сверхпроводимость в допированном многослойном графене

НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ, НАНОЭЛЕКТРОНИКА

Одноатомный транзистор

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

- 4 Ротонная коллективная мода в двумерной ферми-жидкости

СИНХРОТРОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

Новое магнитное состояние в парамагнитной фазе HoCo_2

МАГНИТЫ

- 5 Магнитный изотоп-эффект и влияние магнитного поля на биологические процессы

ФУЛЛЕРЕНА И НАНОТРУБКИ

- 6 Цитотоксичность углеродных нанотрубок снижается под действием белков крови

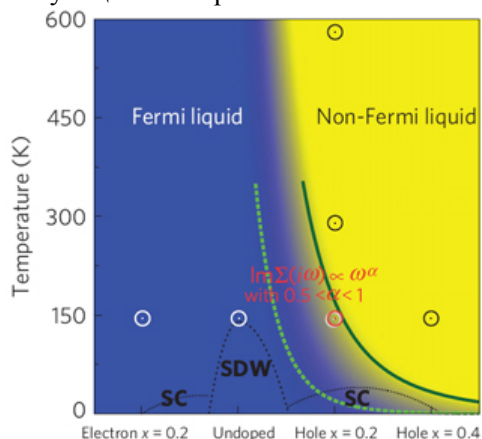
СНОВА К ОСНОВАМ

- 8 Забвение тоже чего-то стоит: экспериментально подтвержден принцип Ландауэра

КОНФЕРЕНЦИИ

2nd International Conference of Asia Union of Magnetism Societies (IcAUMS 2012), 2-5 October 2012, Nara, Japan

некогерентного металла. Помимо допирования, электронная структура BaFe_2As_2 сильно зависит от температуры (см. рис.). В [1] отмечено, что критическая температура максимальна при величине x , соответствующей “замерзанию спинов”.



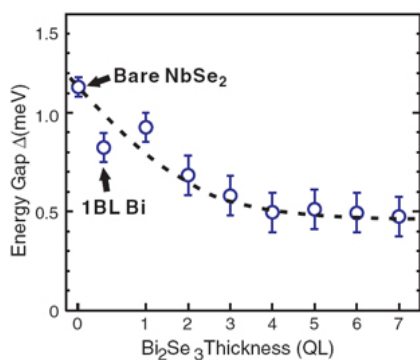
Фазовая диаграмма BaFe_2As_2 в координатах температура – концентрация дырок x . Пунктирная линия – граница области, в которой показатель α в зависимости $\chi \sim \omega^\alpha$ меньше единицы. Сплошная линия соответствует $\alpha = 0.5$.

Л. Опенов

1. P. Werner et al., Nature Phys. 8, 331 (2012).

Сосуществование сверхпроводимости и топологического порядка

В топологических диэлектриках формирование топологического порядка не сопровождается нарушением какой-либо симметрии. Комбинация такого порядка с нарушенной симметрией (например, благодаря магнитному или сверхпроводящему упорядочению) может привести к новым квантовым явлениям, таким как аномальный квантовый эффект Холла, топологическая сверхпроводимость и др. В работе [1] китайские и американские физики обнаружили сосуществование топологического и сверхпроводящего порядков на поверхности тонких пленок Bi_2Se_3 . Сверхпроводимость этих пленок индуцировалась за счет эффекта близости со сверхпроводящей подложкой NbSe_2 (см. рис.).



Сверхпроводящая щель в пленках Bi_2Se_3 различной толщины на подложке 2H-NbSe_2 (0001)

При этом топологический порядок сохраняется, о чем свидетельствует фото-

эмиссионная спектроскопия с угловым разрешением. Гетероструктуры $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{NbSe}_2$ можно попытаться использовать для наблюдения фермионов Майорана.

1. M.-X. Wang et al., Science 336, 52 (2012).

ГРАФЕН

Лазерный метод выращивания графена

Работы, направленные на получение, исследование и практическое использование графена, проводятся широким фронтом во многих лабораториях мира. Важное место среди них занимают исследования, посвященные развитию новых методов получения графена, каждый из которых приводит к синтезу материала со своими характерными особенностями, которые могут проявиться и оказаться ценными в той или иной практической ситуации. Примером может служить работа [1], выполненная недавно в Purdue Univ. (США), авторы которой осуществили прямой синтез графена на кремниевой (n-типа) подложке размером $2 \times 1 \text{ см}^2$, используя лазерное облучение.

В качестве источника углерода использовали тонкую пленку полиметилметакрилата (PMMA), покрывающую подложку. Под действием лазерного облучения пленка подвергалась термолизу, в результате которого атомы углерода проникали в кремниевую подложку. Во избежание нежелательных потерь углерода подложку с пленкой PMMA покрывали кварцевой пластиной, прозрачной для лазерного излучения. После охлаждения подложки часть растворенного в кремнии углерода выделялась, образуя графеновую пленку. Эксперименты показали, что рост графеновых пленок происходит лишь при превышении определенной интенсивности лазерного облучения, обуславливающей частичное плавление подложки. Согласно фазовой диаграмме системы C – Si растворимость углерода в кремнии при температурах $1200\text{-}1400^\circ\text{C}$ составляет лишь $10^{-4}\text{-}10^{-3} \%$, в то время как в жидком кремнии при температуре эвтектики (1404°C) она достигает $0.75 \text{ ат.} \%$.

Процесс осуществляли в атмосфере азота при давлении ниже 0.1 Торр . Луч Nd:YAG лазера непрерывного действия (вторая гармоника, $\lambda = 532 \text{ нм}$) мощностью 3.1 Вт фокусировали на поверхность подложки в пятно диаметром около 20 мкм с помощью линзы с фокусным расстоянием 150 мм . Длительность облучения составляла 5 мин . Рост графеновых пленок регистрировали по изменениям спектров комбинационного рассеяния (КР) образца в процессе облучения. Согласно измерениям, соотношение интенсивностей D-пика (1348 см^{-1}) и G-пика (1590 см^{-1}) составляет 0.076 , что указывает на малое содержание дефектов в структуре графеновой пленки. Кроме того, характер спектра КР позволяет заключить, что полученная пленка состоит из 2-3-слойных листов графена.

Преимущества описанного метода синтеза графеновых пленок заключаются в простоте его реализации, отсутствии необходимости использования катализаторов, загрязняющих образцы, а также в возможности получения графеновой пленки непосредственно на подложках из легированного крем-

ния, который является базовым элементом современной микроэлектроники.

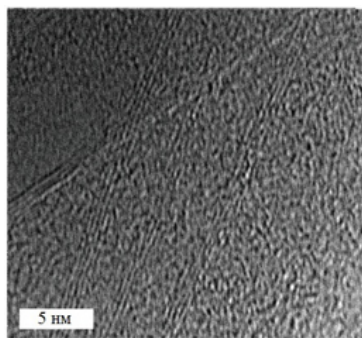
А.Елецкий

I. D. Wei, X. Xu, Appl. Phys. Lett. 100, 023110 (2012).

Сверхпроводимость в допированном многослойном графене

Китайские исследователи сообщают об успешном синтезе сверхпроводника на основе многослойного графена (few-layer graphene – FLG) с критической температурой около 4.5 К [1]. Образцы графена допированные калием (K-FLG) авторы получили в рамках методов “мокрой” химии (wet chemistry), используя графитовые хлопья, бинарный натриево-калиевый сплав и диметоксиэтан в качестве пропитывающего вещества. Необходимое для возникновения сверхпроводимости содержание калия обеспечилось в результате химического травления этанолом. Энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия подтвердила отсутствие примесей натрия в полученных образцах, а дальнейшие исследования в рамках просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения показали, что изготовленный таким образом материал состоит всего из четырех слоев (рис. 1).

Рис. 1. Изображение, полученное с помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, демонстрирующее слоистую структуру материала. Число темных линий указывает на то, что синтезированные образцы FLG состоят из четырех графеновых слоев.



Затем авторы исследовали температурные зависимости магнитной восприимчивости K-FLG в диапазоне от 2.5 до 6 К в двух режимах охлаждения образца: охлаждение в нулевом магнитном поле (zero-field-cooling – ZFC) и охлаждение в магнитном поле 50 Э (field-cooling – FC). Исследователи обнаружили, что магнитная восприимчивость, измеренная в ZFC режиме, претерпевает резкий спад при ~ 4.5 К (см. рис. 2) – поведение характерное для сверхпроводника.

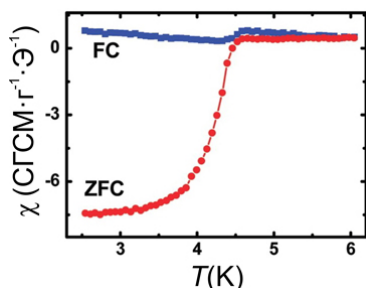


Рис. 2. Температурные зависимости магнитной восприимчивости образца K-FLG, полученные из ZFC (красный) и FC (синий) измерений.

Более того, дальнейшие измерения продемонстрировали, что сверхпроводимость образца не разрушается и в слабых магнитных полях вплоть до 1 кЭ. По мнению авторов, при оптимальном уровне допирования сверхпроводимость может быть достигнута и в однослойном графене, что позволит создавать на его основе принципиально новые электронные устройства.

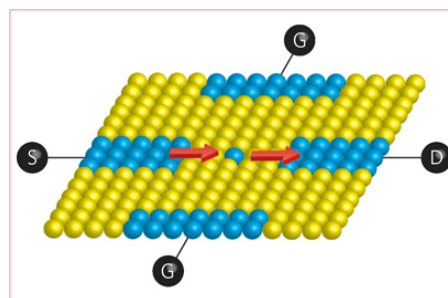
М.Маслов

I. M. Xue et al., J. Am. Chem. Soc. 134, 6536 (2012).

НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ, НАНОЭЛЕКТРОНИКА

Одноатомный транзистор

На протяжении нескольких последних десятилетий размеры кремниевых транзисторов неуклонно уменьшались, достигнув в итоге ~ 30 нм. Дальнейшая миниатюризация этих основных компонентов электронных устройств осложняется сильными флуктуациями количества и положения легирующих атомов в канале транзистора, что влечет за собой невоспроизводимость характеристик. Альтернативой подходу “сверху вниз” (top-down) является подход “снизу вверх” (bottom-up), когда наноразмерные устройства собираются из отдельных атомов, как из деталей детского конструктора. Однако если для манипуляций отдельными атомами и молекулами на твердой поверхности можно использовать сканирующий туннельный микроскоп (СТМ), то в кремнии такой атомной сборке препятствуют прочные ковалентные связи Si–Si. В работе [1] (Австралия, Корея, США) одноатомный кремниевый транзистор изготовлен путем комбинации СТМ и литографии водородного резиста. На первом этапе поверхность (100) кремниевой подложки покрывали слоем водорода. Затем атомы водорода удаляли с определенных участков поверхности иглой СТМ и помещали подложку в фосфин (PH₃). Оставшийся водород играл роль маски, препятствуя сорбции молекул PH₃, а на “незащищенных” участках эти молекулы диссоциировали с образованием атомов P. В итоге получался транзистор с каналом из одного-единственного атома фосфора и “фосфорными электродами” (см. рис.).



Схематическое изображение одноатомного транзистора. Желтые и синие сферы – атомы кремния и фосфора, соответственно. Стрелки указывают направление протекания электрического тока от источника (S) к стоку (D) при подаче соответствующего напряжения на управляющий электрод (G).

На завершающей стадии получившуюся наноструктуру наращивали сверху слоем кремния, в результате чего все атомы Р оставались фиксированными в заданных положениях с точностью ± 1 узел решетки ($\pm 3.8 \text{ \AA}$) и защищенными от воздействия окружения. При управляющем напряжении чуть меньше пороговой величины такой транзистор ведет себя как квантовая точка, демонстрируя эффекты кулоновской блокады. Развитую в [1] методику можно также использовать для изготовления квантовых информационных устройств, в которых базисные состояния кубитов формируются спиновыми или зарядовыми состояниями изолированных доноров фосфора. Что же касается транзисторов, то мы подошли к естественному физическому пределу, за которым перестает выполняться закон Мура об экспоненциальном росте плотности элементов на микросхеме.

I. M.Fuechsle et al., Nature Nanotechn. 7, 242 (2012).

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

Ротонная коллективная мода в двумерной ферми-жидкости

Жидкий ^3He представляет собой простейшую модельную систему для исследования динамики сильнокоррелированных фермионов. При малых импульсах в этой системе имеются два типа низкоэнергетических элементарных возбуждений: так называемый “нулевой звук” (коллективные колебания плотности) и возбуждения типа частица-дырка. И те, и другие хорошо описываются теорией ферми-жидкости Ландау. В работе [1] (Франция, Финляндия, США, Австрия) при изучении неупругого рассеяния нейтронов на монослой жидкого ^3He обнаружена еще одна коллективная мода, но уже при больших импульсах, более чем в два раза превышающих импульс Ферми. Эта мода аналогична ротонной моде в бозе-жидкости ^4He . Для объяснения полученных результатов авторы [1] используют обобщенную для ферми-системы динамическую теорию многих тел, в которой учитывается зависимость межчастичного взаимодействия от энергии. Они обращают внимание на возможную причастность такого рода когерентных возбуждений с большими импульсами к спариванию носителей заряда в высокотемпературных сверхпроводниках.

I. H.Godfrin et al., Nature 483, 576 (2012).

СИНХРОТРОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

Новое магнитное состояние в парамагнитной фазе HoCo_2

Редкоземельные интерметаллиды ReCo_2 известны как класс модельных соединений, в которых обменное взаимодействие между спинами редкой земли и кобальта всегда отрицательно и приводит к их антипараллельной ориентации. В 2007г. в соединении ErCo_2 в парамагнитной фазе было обнаруже-

но новое магнитное состояние [1], названное авторами этой работы “паримагнетизмом”. Это состояние, в котором моменты ионов Со не имеют дальнего порядка, но их суммарный момент во внешнем поле антипараллелен полю и суммарному моменту ионов Ер. Существует это состояние в диапазоне температур выше точки Кюри T_C и ниже характерной температуры спин-флип перехода T_f . С целью проверки существования подобного аномального состояния в других соединениях класса ReCo_2 группа исследователей из Испании, Франции, Германии и США [2] измерила спектры магнитного кругового дихроизма (XMCD) и малоуглового нейтронного рассеяния (SANS) на поликристаллических образцах HoCo_2 . XMCD измерения выполнены на канале UE46-PGM1 синхротрона BESSY. Исследовались спектры рентгеновского поглощения (XAS) и XMCD на $L_{2,3}$ краю Со и M_5 краю Ho при температурах $5\text{K} < T < 350\text{K}$ и магнитном поле $H = 1\text{T}$ (рис. 1). Температура Кюри T_C для этого кристалла равна 76K . Видны изменения знака сигнала XMCD $\text{Co}L_{2,3}$ и $\text{Ho}M_5$ выше 83K , подтверждающие ферримагнитную связь спинов Со и Ho выше точки Кюри.

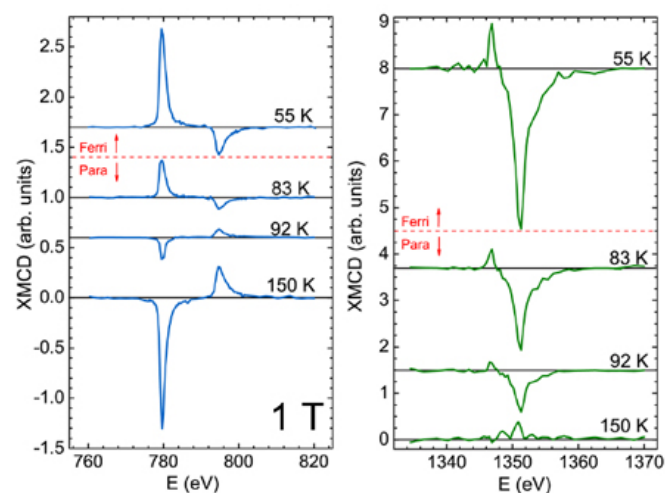


Рис. 1. Спектры XMCD Со $L_{2,3}$ (слева) и Ho M_5 (справа) при разных температурах в поле 1Т. Пунктирная линия разделяет спектры выше и ниже точки Кюри.

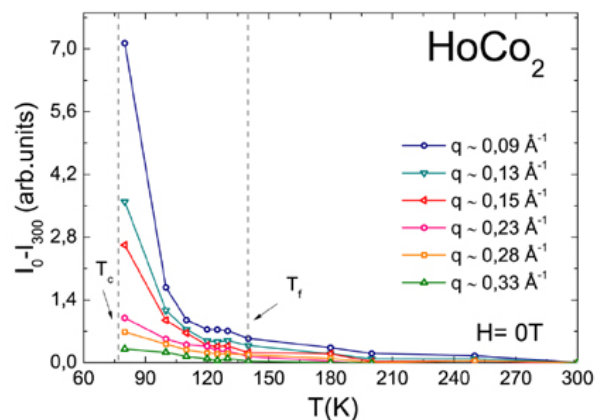


Рис. 2. Температурная зависимость разности интенсивностей нейтронного рассеяния для заданного волнового вектора в нулевом магнитном поле.

Подтверждение ближнего магнитному порядку было найдено на основе данных малоуглового рассеяния нейтронов (SANS), полученных на дифрактометре D16 в ILL, Гренобль. На рис. 2 показаны разности магнитной интенсивности рассеяния I_0 при данной температуре T и I_{300} при $T=300\text{K}$ для различных волновых векторов в нулевом магнитном поле. Видна расходимость при установлении дальнего магнитного порядка в точке Кюри T_C и появление плато ниже температуры спин-флип перехода $T_f=140\text{K}$.

Сам по себе факт наличия ближнего магнитного порядка выше точки Кюри не удивителен. В данном случае удивителен широкий диапазон температур, в котором имеет место развитый ближний порядок. Например, широкая область ближнего антиферромагнитного порядка в высокотемпературных сверхпроводящих купратах имеет понятную причину в виде квазидвумерности спиновой системы. В рассмотренных выше редкоземельных кобальтатах причина появления "парамагнетизма" неясна, попытки объяснения авторов [2] не выглядят убедительно. Тем не менее, температурная эволюция спектров ХМCD крайне интересна, и в целом обнаруженное явление заслуживает дальнейшего изучения.

С.Овчинников

1. J.Herrero-Albillos et al., Phys. Rev. B 76, 094409 (2007).
2. С.М.Бонилла et al., J. Appl. Phys. 111, 07E315 (2012).

МАГНИТЫ

Магнитный изотоп-эффект и влияние магнитного поля на биологические процессы

Синтез молекулярных энергоносителей в живых организмах осуществляется ферментами - молекулярными машинами. Все они работают только в присутствии ионов магния. Но если в ферментах заменить природный магний его чистой изотопной формой ^{25}Mg , то производство энергоносителей возрастает в 2-3 раза. Это открытие авторов [1-3] послужило основой создания новых медицинских средств против гипоксии и сердечной недостаточности.

Все живые организмы производят молекулярные энергоносители – нуклеозидтрифосфаты. Прекращение этого процесса означает гибель организма. Главный из нуклеозидтрифосфатов – аденозинтрифосфат (АТФ) (рис. 1).

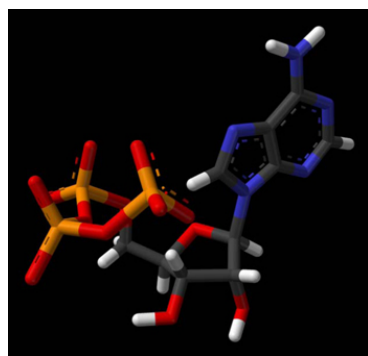


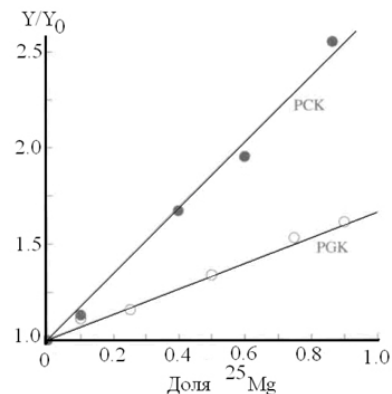
Рис.1. Аденозинтрифосфат (АТФ)

АТФ нужен для мышечного сокращения, переваривания и усвоения пищи, химического превращения (метаболизм) веществ в организме,

синтеза нуклеиновых кислот и белков, проводимости нервных импульсов, синтеза нейромедиаторов, ответственных за память, мышление и эмоции, деления и роста клеток, функционирования иммунной системы, зрения, свёртывания крови и заживления ран, а также для множества других процессов.

Что же происходит при замене изотопов магния? Большинство химических элементов имеют стабильные изотопы, отличающиеся и массой, и магнитными характеристиками атомных ядер. Некоторые изотопы, например, ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{25}Mg , ^{31}P , характеризуются наличием ядерных магнитных моментов, или ядерных спинов, и называются магнитными. Все остальные изотопы немагнитны. Различия атомных масс и магнитных свойств изотопов являются причиной масс-зависимых и магнитно-изотопных эффектов, соответственно. Известно множество масс-зависимых изотопных эффектов, проявляющихся в виде изменения скорости протекания химических реакций. Магнитно-изотопные же эффекты в химии характерны только для радикальных реакций. Они обусловлены, главным образом, влиянием ядерного магнитного момента на спиновую эволюцию радикальных пар (РП), судьба которых (внутриклеточная рекомбинация или внеклеточные реакции) определяется действием спиновых запретов и правил отбора.

Рис. 2. Зависимость относительного выхода АТФ от доли изотопа ^{25}Mg для креатинкиназы (РСК) и фосфоглицеракиназы (РГК).



Наблюдаемый авторами [1-3] ядерно-магнитный изотопный эффект – прямое доказательство того, что механизм реакции включает образование и превращение парамагнитных частиц - радикалов или ион-радикалов, каждый из которых несёт одиночный (неспаренный) электрон, носитель парамагнетизма. Магнитный изотоп-эффект с участием магния означает, что синтез АТФ является ион-радикальной реакцией, первая стадия которой – перенос электрона от аниона фосфатной группы АДФ к иону Mg^{2+} ; при этом рождается пара радикалов – парамагнитный катион Mg^+ и фосфатный радикал. В такой паре есть два состояния – синглетное, когда угловые моменты неспаренных электронов вычитаются (компенсируются), и триплетное, когда угловые моменты складываются. Эти два состояния создают два канала фосфорилирования – синглетный и триплетный. Фундаментальная роль иона $^{25}\text{Mg}^+$ состоит в том, что магнитный момент ядра ^{25}Mg изменяет электронный угловой момент и стимулирует триплетный канал фосфорили-

рования. Выход АТФ в этом канале в 2-3 раза выше, чем в синглетном (рис. 2).

О существовании такого механизма синтеза АТФ ранее даже не догадывались. Его обнаружили только при изотопическом замещении магния. Еще одним доказательством является зависимость фосфорилирования от внешнего магнитного поля. Ведь электронный угловой момент пары радикалов можно изменить не только внутренним полем магнитного ядра ^{25}Mg , но и внешним. Экспериментально этот эффект также был обнаружен.

Еще одна группа исследователей [4] подтвердила магнитный изотопный эффект на примере клеток *Escherichia coli* – музейный штамм K12TG1. Бактерии *E.coli* выращивали в минимальных синтетических питательных средах, которые различались только изотопной формой содержащегося в сульфате магния – (немагнитные ^{24}Mg , ^{26}Mg , магнитный ^{25}Mg и природный изотоп $^*\text{Mg}$) магния. Присутствие магнитного изотопа магния ^{25}Mg в питательной среде увеличивает скорость роста и колониеобразующую способность микроорганизмов по сравнению с немагнитными изотопами магния $^{24,26}\text{Mg}$. Обнаруженные биологические магнитно-изотопные эффекты магния на клетки *E.coli* свидетельствуют о влиянии магнитных моментов ядер изотопа ^{25}Mg на жизнедеятельность целого организма через последовательность внутриклеточных ферментативных процессов, в том числе синтеза АТФ. В то же время недавно вышла статья [5], в которой была предпринята попытка опровергнуть существование магнитно-изотопного эффекта в АТФ. Однако авторы [5] совершили ошибку, взяв в качестве исходных материалов образцы с высоким содержанием железа, наличие которого “убивает” эффект.

Подобные эффекты могут быть обнаружены и для других стабильных магнитных изотопов жизненно важных внутриклеточных элементов. Наблюдение и магнитно-изотопного, и магнитно-полевого эффектов ставит на прочный физический фундамент всю магнитобиологию – и в постоянных, и в переменных полях.

О. Коплак

1. А.Л.Бучаченко и др., Доклады Академии наук **396**, 828 (2004).
2. A.L.Buchachenko et al., Proc. Natl. Acad. Sci. **102**, 10793 (2005).
3. A.L.Buchachenko, “Magnetic isotope effects in chemistry and biochemistry” - New York: Nova Science Publishers (2009).
4. U.Shevchenko et al., Proc. 4th Intern Conf. on Magneto-Science. Shanghai: Shanghai Univ., p. 51 (2011) (<http://www.mag-sci2011.com/Program.asp>).
5. D.Crotty et al., Proc. Natl. Acad. Sci. **109**, 1437 (2012).

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Цитотоксичность углеродных нанотрубок снижается под действием белков крови

Изучение взаимодействия белков крови и углеродных нанотрубок (УНТ) чрезвычайно важно, ведь при использовании УНТ в биомедицинских целях они обязательно попадут в кровеносную систему. Кроме того, возможно и случайное проникновение из окружающей среды. Известно, что в биологической жидкости (крови, лимфе, жидкости оболочки легкого и др.) поверхность наночастиц модифицируется – покрывается “белковой короной”- слоем адсорбированных белков [1]. Эта “корона” во многом определяет дальнейшую судьбу наночастиц, их распределение в тканях, вывод из организма. Тем не менее, механизмы адсорбции белков плазмы крови на УНТ до сих пор не были исследованы. Учёные из Китая и США впервые показали, что адсорбция связана с уникальной структурой белков и зависит от количества гидрофобных аминокислотных остатков [2]. Для исследований они использовали атомно-силовую микроскопию, ЯМР, флуоресцентную микроскопию и др., а также методы молекулярного моделирования. Были изучены белки BFG (бычий фибриноген), Ig (гамма-глобулин), Tf (трансферрин), BSA (бычий сывороточный альбумин) и (в некоторых экспериментах) ферритин*. Одностенные нанотрубки (ОСНТ) высокой чистоты имели диаметр 2-5 нм и длину (в пучках) 30 мкм.

Учёные обнаружили следующее: молекулы BFG и Ig (глобулярных белков с большой молекулярной массой) сначала адсорбируются неравномерно и образуют на поверхности ОСНТ агрегаты. Уже через 10 мин во вторичной структуре** этих белков происходят необратимые изменения, например, уменьшается число α -спиралей. Адсорбция происходит медленно, термодинамически стабильное состояние достигается только через 5 ч. Адсорбция молекул Tf и BSA идёт равномерно и быстро – достаточно 10 мин. Вторичная структура Tf и BSA не меняется (или быстро восстанавливается). Все изученные белки, кроме BSA, образуют на поверхности ОСНТ сходные “узловые” структуры, но с разными расстояниями между узлами. Маленькие сферические молекулы BSA адсорбируются равномерно и покрывают ОСНТ слой за слоем.

Связывание белков и ОСНТ авторы [2] проиллюстрировали с помощью моделирования методами молекулярной динамики (рис. 1).

Авторы [2] обнаружили, что степень сорбции уменьшается следующим образом: BFG > Ig > Tf > BSA > ферритин. По мнению учёных, основные факторы, которые влияют на взаимодействие между белками крови и ОСНТ и определяют сорбционную ёмкость, следующие:

1) количество поверхностных гидрофобных остатков – 88(BFG) > 37(Ig) > 29(Tf) > 20(BSA),

2) молекулярная масса, или размер белка – BFG > Ig > Tf > BSA,

3) общее число гидрофобных остатков белка – например, у BFG их 276, хотя поверхностных всего 88, поэтому адсорбция происходит очень медленно; у BSA их всего 54, а поверхностных 20, и адсорбция протекает намного быстрее.

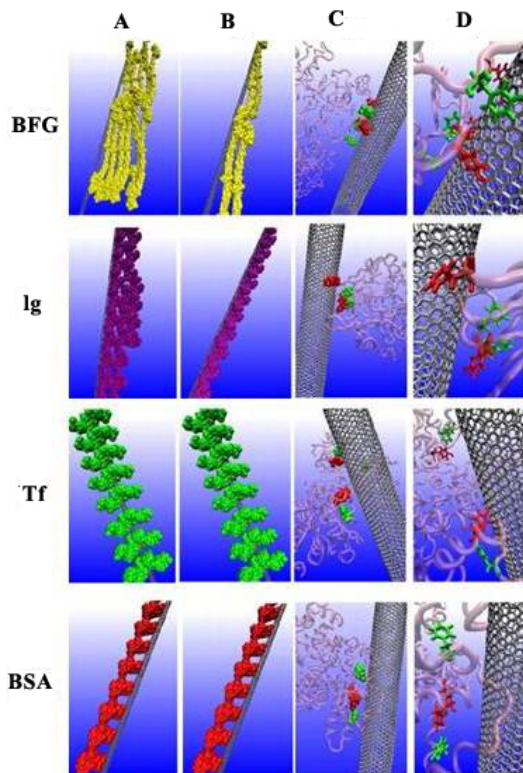


Рис. 1. Адсорбция различных белков на ОСНТ. А – через 10 мин инкубации; В – через 5 ч.; С, D – детали адсорбции [выделены гидрофобные остатки аминокислот: тирозин (красным цветом) и фенилаланин (зелёным цветом) на расстоянии до 0.5 нм от поверхности ОСНТ]; D – показана ориентация ароматических (бензольных) колец при взаимодействии с 6-членными кольцами ОСНТ.

Дальнейший анализ [2] показал, что определяющую роль в селективном связывании белков играют π - π ароматические “стэкинг-взаимодействия” (межплоскостные взаимодействия) между кольцами ОСНТ и гидрофобными остатками аминокислот – тирозином, фенилаланином и триптофаном (Trp, Phe, Tyr), которые имеют ароматические (бензольные) кольца (рис. 1D и рис. 2).

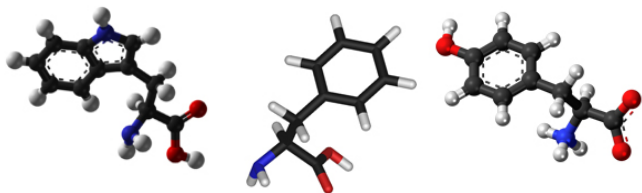


Рис. 2. Гидрофобные ароматические остатки: (слева направо) тирозин, фенилаланин и триптофан

Исследователи проверили, как влияет адсорбция белков на токсичность нанотрубок в отношении двух типов клеток человека, и получили очень интерес-

ные результаты. Вредное воздействие во всех случаях снизилось, а ОСНТ с адсорбированными молекулами BFG оказались практически нетоксичными (рис. 3).

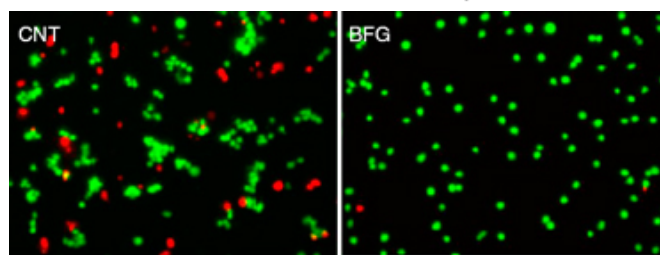
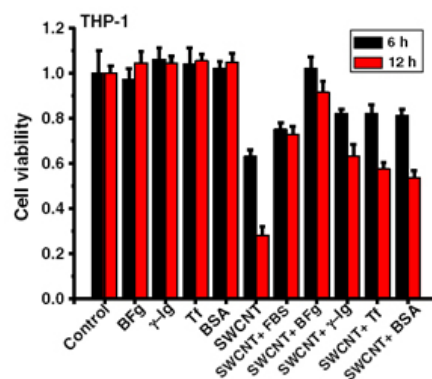


Рис. 3. Вверху – жизнеспособность клеток после 6- и 12-ч воздействия белков, ОСНТ и ОСНТ, покрытых белками. Внизу - живые (зелёные) и мёртвые (красные) клетки линии THP-1 после 12-ч воздействия ОСНТ и BFG/ОСНТ.

Для проверки авторы провели эксперимент с небольшим количеством белка BFG. Токсичность ОСНТ, не полностью покрытых белком, заметно выросла.

Результаты, полученные исследователями [2], помогут в создании безопасных наноматериалов для биомедицины.

* **Фибриноген** играет важную роль в процессе свертывания крови; **гамма-глобулины** выполняют функцию антител; **трансферрины** осуществляют транспорт ионов железа; **альбумин** поддерживает осмотическое давление плазмы, является транспортным белком (составляет 55-65 % от общего количества белков плазмы крови); **ферритин** – основное внутриклеточное депо железа.

** Первичная постоянная структура белка – порядок расположения ковалентно связанных аминокислот в полипептидной цепи. В результате взаимодействия боковых групп аминокислотных остатков отдельные участки цепи принимают ту или иную конформацию (тип укладки), известную как вторичная структура белков. Наиболее характерными элементами ее являются периодически повторяющиеся α -спираль и β -структура (сложенный слой).

О.Алексеева

1. L.R. Welp et al., Nature 477, 579 (2011).
2. Перст 18, вып. 9, с.4 (2011).

СНОВА К ОСНОВАМ

Забвение тоже чего-то стоит: экспериментально подтвержден принцип Ландауэра

Более 50 лет назад Рольф Ландауэр выдвинул простой принцип, связывающий теорию информации и термодинамику: поскольку стирание информации повышает энтропию системы, то оно сопровождается выделением теплоты [1]. Так, потеря одного бита происходит с выделением энергии, не меньшей $k_B T \ln(2)$, где k_B – постоянная Больцмана, T – температура. Однако даже при нынешнем уровне миниатюризации микроэлектроники характерные энергии переключения транзисторов в тысячи раз больше, поэтому экспериментальная демонстрация принципа Ландауэра в действии представляет собой непростую задачу, с которой недавно справилась французско-германская команда исследователей [2].

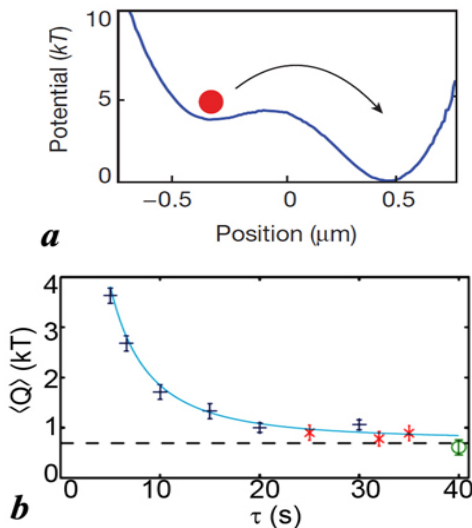


Рис. 1. Проверка принципа Ландауэра на системе с двумя метастабильными состояниями [2]: *a* – частица оксида кремния в созданном лучом лазера эффективном поле с двумя потенциальными минимумами; *b* – по мере увеличения времени перезаписи среднее количество теплоты, выделяемое при стирании бита информации, стремится к ландауэровскому пределу (штриховая линия).

Для этого они воспользовались оптическим пинцетом – устройством, позволяющим манипулировать микрочастицами с помощью света: прозрачная частица улавливается в области перетяжки сфокусированного лазерного пучка. Фокусируя луч света попеременно в двух соседних областях с высокой час-

тотой переключения, они создали для частицы оксида кремния микронных размеров потенциал с двумя минимумами, соответствующими логической единице и нулю (рис. 1а). С помощью оптического пинцета также можно управлять высотой потенциального барьера, разделяющего ямы, перебрасывая частицу между двумя состояниями. Информация считается стертой, если система переводится в одно из состояний вне зависимости от начального положения частицы.

На протяжении всего процесса положение частицы отслеживалось высокоскоростной камерой, так что у исследователей была возможность оценить энергию, рассеянную при акте стирания информации. Повторяя этот процесс сотни раз, исследователи получили среднее количество выделяющейся теплоты, а также измерили его зависимость от интервала времени, в течение которого осуществлялся процесс стирания бита. Как и предсказывает теория, количество теплоты уменьшалось, стремясь к величине, предсказанной Ландауэром $k_B T \ln(2)$. И хотя достижение предела Ландауэра при нынешних темпах развития электроники обещают в далеком 2035 г. [3], разработка путей его обхода (концепции обратимых вычислений) начавшаяся все в том же 1961, идет полным ходом.

А. Пятаков

1. R.Landauer, *IBM J. Res. Develop.* 5, 183 (1961).
2. A.Berut et al., *Nature* 483, 187 (2012).
3. H.Johnston, (<http://physicsworld.com/cws/article/news/2012/mar/12/wiping-data-will-cost-you-energy>).

КОНФЕРЕНЦИИ

2nd International Conference of Asia Union of Magnetics Societies (IcAUMS 2012), 2-5 October 2012, Nara, Japan

With joint efforts made by the Japan Magnetic Society, the IcaUMS2012 will be the Asia's key forum to showcase the latest progress in magnetism and magnetic technologies and be one of the most widely recognized events.

Deadline for abstract submission – 24 May 2012

Web: <http://www.magnetics.jp/icaums2012/index.html>

E-mail: msj@bj.wakwak.com

Экспресс-бюллетень ПерсТ издается совместной информационной группой
ИФТТ РАН и НИЦ “Курчатовский институт”

Главный редактор: И.Чугуева, e-mail: irina@issp.ras.ru

Научные редакторы К.Кугель, Ю.Метлин

В подготовке выпуска принимали участие О.Алексеева, А.Елецкий, О.Коплак,

М.Маслов, С.Овчинников, Л.Опенев, А.Пятаков

Выпускающий редактор: И.Фурлетова

Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64^а