ПерсТ
Информационный бюллетень
перспективные технологии
наноструктуры сверхпроводники фуллерены
http://perst.issp.ras.ru
ISSN: 2782-5515

Том 28, выпуск 9/10 май 2021 г.

В этом выпуске:

НАНОСТРУКТУРЫ, НАНОТЕХНОЛОГИИ

Наногибриды сражаются с опасными бактериями в клетках человека

Серьезной угрозой для здоровья и жизни людей является растущая устойчивость микробов к лекарственным препаратам. Одним из наиболее известных возбудителей инфекций в больницах, а также и в быту является золотистый стафилококк *S. Aureus*. Эти бактерии присутствуют на кожных покровах и на слизистых оболочках (например, в носоглотке) большинства людей и не страшны для здорового человека. Однако попадание внутрь организма через повреждения кожи, кровь, а также с медицинскими инструментами, пищей и др. может привести к воспалениям и поражениям органов. В 40-х годах прошлого века с этим стафилококком успешно боролись с помощью пенициллина, но довольно скоро были выявлены пенициллин-устойчивые штаммы, а с 1980-х годов появились штаммы так называемого метицилин-резистентного *S. Aureus* (MRSA). Они устойчивы к большой группе антибиотиков и очень трудно поддаются лечению. MRSA инфекции могут вызвать целый ряд серьезных заболеваний лёгких, суставов, костей, кожи, мягких тканей; приводят к абсцессам и существенно повышают вероятность смерти инфицированных больных. Исследования показали, что штаммы MRSA могут выживать внутри клеток, прятаться в макрофагах, хотя макрофаги («макро-пожиратели») – это клетки иммунной защиты, которые распознают, захватывают и переваривают чужеродные объекты. Обычные противомикробные средства не проникают внутрь клеток. При использовании специальных носителей для доставки лекарственных средств возникают проблемы, связанные с необходимостью обеспечить как контролируемое выделение препарата, так и совместимость с клетками человека.

Ученые из Швейцарии впервые предложили объединить действующее вещество и носитель в общую функциональную систему, которая сочетает противомикробную активность и биосовместимость [1]. Созданные ими гибридные наночастицы (наногибриды) существенно снижают жизнеспособность MRSA, не повреждая макрофаги, внутри которых эти бактерии скрываются от лекарств.

Наногибриды состоят из биостекла и наночастиц диоксида церия. Биостекло – это биоразлагаемый, биологически активный керамический материал (базовый состав – смесь SiO_2,

И далее ...

МИКРОТЕХНОЛОГИИ

3 Активный гидродинамический плащ-невидимка

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

4 Кобальтсодержащие фуллереновые комплексы для водородных накопителей

КОНФЕРЕНЦИИ

5 Вторая Международная Конференция “Физика конденсированных состояний” (ФКС-2021), посвященная 90-летию со дня рождения академика Ю.А. Осипьяна, 31 мая – 4 июня 2021 г., Черноголовка, Россия

10th Anniversary International Conference on “Physics and Mechanics of New Material and Their Applications” (PHENMA-2021) 29 ноября - 3 декабря 2021 г., Ростов-на-Дону, Россия

CaO, Na_2O и P_2O_5). Изобрел биостекло в 1969 году американский ученый Larry L. Hench. Сначала этот материал использовали в ортопедии и стоматологии (кстати, сейчас биостекло вводят в состав некоторых зубных паст для регенерации эмали), но дальнейшие исследования показали, что эти биоактивные стекла можно применять для восстановления и костей, и хрящей, и даже мягких тканей, особенно при включении Sr в матрицу [2]. Наночастицы диоксида церия CeO_2 обладают уникальными свойствами. В их поверхностном слое одновременно присутствуют ионы Ce^{3+} и Ce^{4+}, что позволяет наночастицам легко вступать в циклические окислительно-восстановительные реакции. Подобно природным ферментам наночастицы могут обратимо связывать кислород и действовать как антиоксиданты, помогая бороться с сердечно-сосудистыми и другими серьезными заболеваниями [3]. Они не токсичны для клеток человека, но обладают противомикробной активностью, которая также обусловлена обратимыми переходами между Ce^{3+} и Ce^{4+} [4]. Однако, как отмечают авторы работы [1], антибактериальное действие наночастиц диоксида церия внутри клеток человека до их исследований не было продемонстрировано.

Наногибриды имеют сложный состав, тем не менее, авторы разработали простой одностадийный способ их синтеза. Использовали пиролиз с пламенным распылением жидких металлоорганических прекурсоров (растворов целевых компонентов в органических горючих растворителях). Важно, что этот метод позволяет получать наночастицы в больших количествах.

На рис. 1 приведена схема действия наногибридов на бактерии внутри клетки. Поскольку наногибриды имеют такие же размеры и поверхностный заряд, как и стафилококки, они проникая в клетки, собираются в тех же отделах и разрушают бактерии.

Используя биологические методы авторы [1] убедились в безопасности гибридных наночастиц для клеток человека. Затем с помощью электронной микроскопии (ЭМ), энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДРС) они продемонстрировали воздействие наногибридов на метицилин-резистентные бактерии *S. Aureus* в макрофагах человека (рис. 2). В макрофаге без наногибридов видно большое количество живых неповрежденных бактерий (рис. 2a). Воздействие гибридных наночастиц на мембраны бактерий приводит к их постепенному растворению. О наличии повреждений свидетельствует диффузная оболочка и уменьшение размеров *S. Aureus* (рис. 2 b,c).

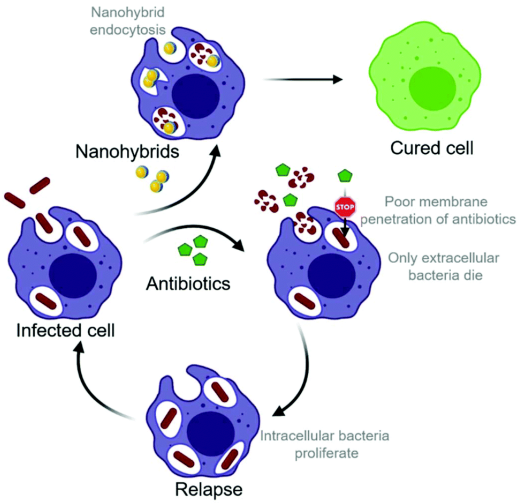


Рис. 1. Схема действия наногибридов. Антибиотики (зеленый цвет) не проникают в инфицированную клетку и действуют только на бактерии (коричневый цвет) снаружи. Внутри клетки бактерии размножаются. Наногибриды (желтый цвет) имеют размеры и поверхностный заряд, близкие к этим характеристикам бактерий, поэтому проникают в те же отделы клетки и разрушают стафилококки. Клетка здорова (зеленый цвет).

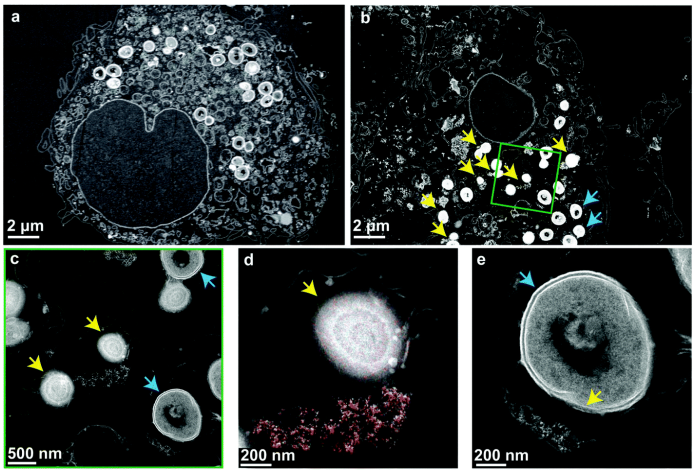


Рис. 2. ЭМ изображения макрофагов человека, инфицированных MRSA (голубые стрелки указывают на неповрежденные мембраны бактерий, желтые – на подвергшиеся воздействию наногибридов (частично растворенные)): a - макрофаг с бактериями внутри до обработки; b - макрофаг с наногибридами (видно, что наночастицы находятся в одном клеточном отделе с бактериями); c - область внутри зеленого квадрата с большим разрешением; d - данные ЭДРС (Ce – красный цвет) показывают, что наногибриды локализуются около растворенных бактерий; e - бактерия частично растворилась после контакта с небольшим количеством наногибридных частиц.

Исследователи [1] полагают, что гибель бактерий происходит из-за воздействия на их клеточные мембраны активных форм кислорода, создаваемых наночастицами церия. Мембраны клеток человека устроены по-другому и не повреждаются. Детальный механизм пока не ясен, но авторы уверены, что эффект будет длительным, т.к. постоянно происходит регенерация степени окисления церия в наночастицах. Устойчивость к наногибридам не возникнет. В дальнейшем исследователи планируют оптимизировать структуру и состав гибридных наночастиц.

О. Алексеева

1. *M.T.Matter et al., Nanoscale* ***13****, 8224 (2021).*
2. *F.Baino et al., J. Funct. Biomater.* ***9****, 25, (2018).*
3. *ПерсТ* ***26****, вып. 1/4, с.3 (2019).*
4. *M.Qi et al., Front. Mater.* ***7****, 213 (2020).*

МИКРОТЕХНОЛОГИИ

Активный гидродинамический плащ-невидимка

Создание покрытий, позволяющих управлять дифракцией волн на объекте – задача, притягательная как с фундаментальных, так и с практических позиций. Такие покрытия создаются на основе метаматериалов. Уже создан трехмерный “плащ-невидимка”, позволяющий скрыть небольшой объект от оптического излучения в некотором диапазоне длин волн и углов обзора. Идеология расчётов строится на сложном распределении показателя преломления, отклоняющем лучи в сторону от объекта. Такие системы разрабатываются и для акустических волн с использованием пористых сред, а также для волн другой природы.

Кроме традиционного подхода к созданию “плащей-невидимок”, существует и другой – не отклонять волны, а излучать дополнительные волны так, чтобы результирующая волна вдали от объекта оказывалась невозмущенной.

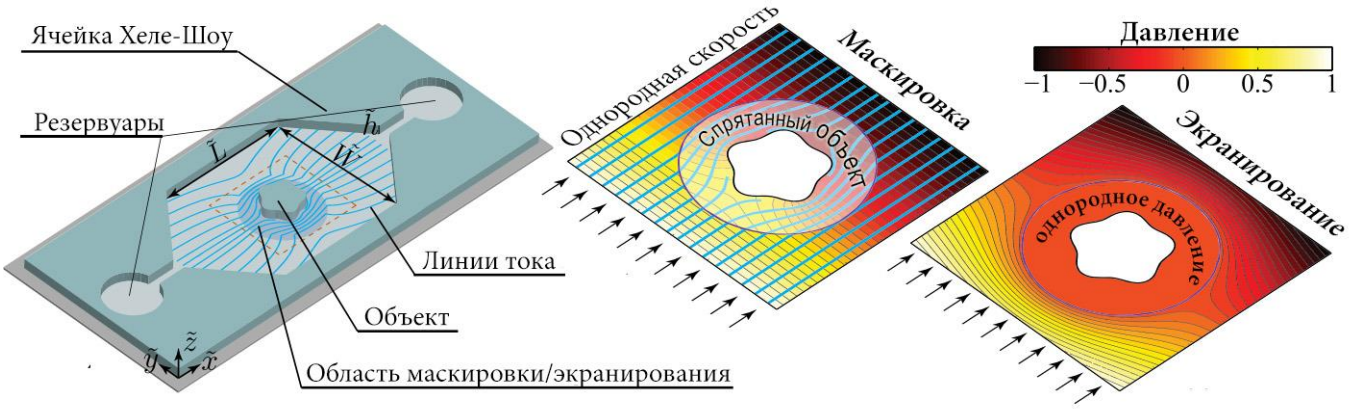


Рис. 1. Микрофлюидная ячейка и распределение давлений и линий тока при решении задач маскировки и экранирования.

На этом принципе международная команда исследователей создала гидродинамический плащ-невидимку [1]. Авторы решили задачу активной маскировки, делающей объект полностью невидимым для наблюдателя на выходе потока. Параллельно была решена и другая задача – экранирование самого объекта от волн. При этом, поле давлений вблизи объекта становилось однородным, чтобы объект не почувствовал наличие волн.

Для решения этих задач необходим источник волнового поля, параметрами которого легко управлять извне. Такой источник может быть создан за счет эффекта электроосмоса – генерации потока жидкости при приложении электрического поля. Таким образом, осуществляется электрическое управление потоком, и в зависимости от распределения потенциалов вокруг объекта, можно решить как задачу маскировки, так и задачу экранирования. Экспериментальная установка состоит из микрофлюидной ячейки (см. рис. 1), внутри которой находится объект в форме столбика, заключенный между двумя параллельными пластинами. На нижней пластине вокруг объекта сделан электрод, на который подается напряжение. Ячейка заполнена раствором электролита. Скорость потока контролируется разницей давлений между двумя резервуарами.

В процессе эксперимента меняли разность давлений и напряжение на электроде, и при некоторых условиях наблюдался эффект маскировки или экранирования.

Авторы теоретически рассчитали, каково должно быть напряжение на электроде, чтобы генерируемый за счет электроосмоса поток жидкости выполнял необходимую задачу маскировки или экранирования. Задача решена для двумерного случая, теория находится в хорошем согласии с экспериментом.

Преимущество такой активной системы маскировки и экранирования перед традиционными заключается в возможности перестройки. Меняя напряжение на электроде, можно легко снять “плащ-невидимку”.

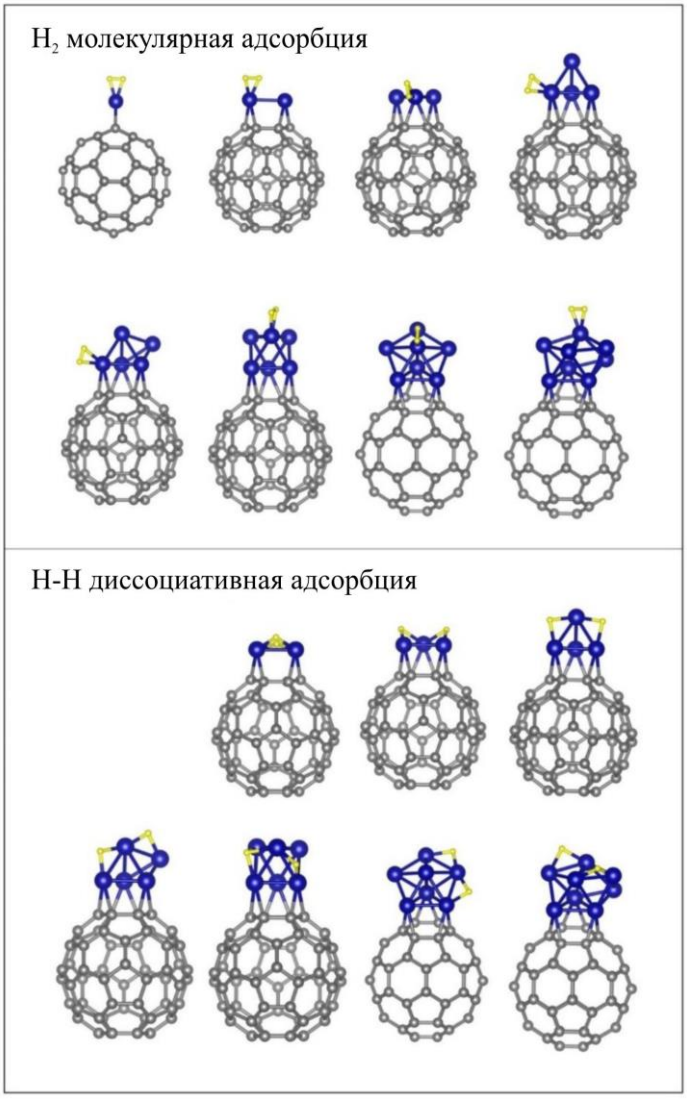
З. Пятакова

1. E.Boyko et al., Phys. Rev. Lett. ***126****, 184502 (2021).*

ФУЛЛЕРЕНЫ И НАНОТРУБКИ

Кобальтсодержащие фуллереновые комплексы для водородных накопителей

Наверное, уже можно без сомнения говорить о том, что водород стал уверенным кандидатом на замену традиционного “жидкого горючего” в ближайшем будущем. Современные двигатели становятся все более и более технологичными, и водородные топливные элементы уже не кажутся чем-то далеким и удивительным. Поэтому одно из наиболее активных направлений материаловедения сегодня связано с вопросами адсорбции, хранения и транспортировки водорода. Часто роль таких “аккумуляторов” примеряют на себя углеродные наноструктуры. Ученые из Valladolid Univ. (Испания) и KU Leuven (Бельгия) [1] рассмотрели классические фуллерены C_{60}, допированные атомами кобальта. С помощью теории функционала плотности они исследовали молекулярную и диссоциативную адсорбцию H_2 (см. рис.) на нейтральные и положительно заряженные комплексы $C_{60}Co_n$, содержащие от одного до восьми атомов кобальта (n = 1 ÷ 8). Компьютерное моделирование авторы выполняли с помощью программы Quantum Espresso с использованием PAW псевдопотенциалов в рамках GGA-приближения (функционал PBE). Слабое ван-дер-ваальсово взаимодействие, конечно, также принималось во внимание. Авторы установили, что атомы кобальта формируют компактные кластеры на поверхности фуллерена, при этом во всех рассматриваемых случаях (за исключением n = 1 и 2) три атома кобальта формируют ковалентное связывание с фуллереном (см. рис.).



Атомные структуры, соответствующие молекулярной (H_2) и диссоциативной (H-H) адсорбции водорода на нейтральных комплексах $C_{60}Co_n$ (n = 1 ÷ 8). Серые, синие и желтые сферы обозначают атомы углерода, кобальта и водорода, соответственно.

Тем не менее, энергия связи между фуллереном и кластером кобальта меняется в зависимости от эффективных размеров последнего. При этом диссоциативная хемосорбция, то есть адсорбция H_2 в виде отдельных атомов, энергетически более устойчива, чем молекулярная. Единственным очевидным исключением здесь является система $C_{60}Co$, поскольку один атом кобальта не в состоянии образовывать полноценные связи с каждым атомом водорода в отдельности из-за влияния фуллереновой клетки, которая ослабляет его связывающую способность. Процессы молекулярной и диссоциативной адсорбции на нейтральных и положительно заряженных комплексах $C_{60}Co_n$ во многом схо-

жи, однако авторы выделяют ряд особенностей. Например, величины энергий диссоциативной адсорбции на некоторых катионных комплексах $C_{60}Co_n^+$ существенно меньше, чем соответствующие величины на аналогичных (с теми же n) нейтральных комплексах. Разница в энергиях варьируется от 0.2 до 0.5 эВ. Авторы также отмечают, что активационные барьеры, препятствующие распаду H_2, сильно зависят от размера металлокластера и заряда комплекса. Знание этих энергетических барьеров поможет правильной идентификации адсорбционного состояния (молекулярное или диссоциативное) экспериментально полученных гидрированных комплексов $C_{60}Co_n^+$. В заключении авторы проанализировали насыщение кобальтсодержащего комплекса водородом. Так, простой $C_{60}Co$ способен "принимать на борт" три молекулы H_2, а $C_{60}Co_6$ может адсорбировать уже до тринадцати H_2: четыре диссоциированных и девять в виде молекул. По мнению авторов, представленная ими работа поможет исследователям более детально разобраться в физико-химических процессах, происходящих в процессе адсорбции водорода на допированные металлами углеродные наноструктуры и ускорить развитие технологий создания эффективных водородных топливных элементов.

М. Маслов

1. E.Germán et al., Int. J. Hydrogen Energy (2021), DOI:10.1016/j.ijhydene.2021.03.179

КОНФЕРЕНЦИИ

Вторая Международная Конференция "Физика конденсированных состояний" (ФКС-2021), посвященная 90-летию со дня рождения академика Ю.А. Осипьяна, 31 мая – 4 июня 2021 г., г. Черноголовка, Россия

Направления исследований:

1. Физика дефектов
2. Фуллерены и углеродные структуры
3. Сверхпроводимость
4. Низкоразмерные структуры и физика поверхности
5. Физическое материаловедение

Конференция проводится в Институте физики твердого тела РАН.

Сайт конференции: *http://www.issp.ac.ru/pcm2021/* .

онлайн-трансляция по Zoom по адресу *https://us02web.zoom.us/j/85291178593?pwd=enVCdC9MOW81YUFRWjBjUS9NRkpGZz09*
Meeting ID: 852 9117 8593 Passcode: 202375

10th Anniversary International Conference on "Physics and Mechanics of New Material and Their Applications" (PHENMA-2021)
29 ноября - 3 декабря 2021 г.,
г. Ростов-на-Дону, Россия

Scope of the Conference:

1. Materials: Ferro-Piezoelectrics, Semiconductors, Superconductors, Environmental Materials, Composite, Ceramics, Thin Films, Nanomaterials, Advanced Materials for Additive Manufacturing, Metal Engineering Materials, Functionally Graded Materials etc.

2. Synthesis & Processing: Powder Processing, Processing Technologies, Piezoelectric Technologies, MEMS-Processing, etc.

3. Characterization and Research Methods: Material Design, Microstructure Properties, Physical Properties, Mechanical Properties, Strength Properties, Finite-Element Modeling, Mathematical Modeling, Physical Modeling, Physical Experiment, etc.

4. Applications: MEMS, Hetero-structures, Piezotransducers, Energy Harvesting, Superconductive Devices, Light-Emitting Diodes, Multimedia

Communication, Fiber Reinforced Composites, Construction Health Monitoring, Lubricant and Tribology, etc.

5. Underwater Technologies: Underwater Communication, Marine Engineering, Power System, Ocean Energy, etc.

6. Biomedical Engineering: Medical Materials, Nanotechnology in Medicine, Medical Instrumentation, Physical Methods in Medicine, Waste, Biological Product Processing, etc.

7. Industry and Management: CAD/CAM/CAE Application, Industrial Instruments, EDM, Materials Machining, Machines, Design and Building Constructions, etc.

The conference will consist of keynote, oral and poster sessions.

The abstracts up to one page in WORD (*.docx) should be submitted by e-mail before **October 01, 2021** to: parinov_ia@mail.ru and duplicated to iparinov@sfedu.ru . Authors will be notified by **November 01, 2021** whether the contribution has been accepted.

The format to be used is a text within one standard A4 page. A 12point font should be used. The title appears centered. It is separated by an empty line from the author's name, also centered. The name of the author who presents the contribution should be underlined. An empty line separates the name from the author's affiliations and e-mail of corresponding author, also centered. The Abstracts book will be published before conference.

Web site: *https://phenma2021.sfedu.ru/*.

Экспресс-бюллетень ПерсТ
издается информационной группой ИФТТ РАН

Главный редактор: И.Чугуева, e-mail: *ichugueva@yandex.ru*
Научные редакторы К. Кугель, Ю. Метлин
В подготовке выпуска принимали участие О. Алексеева, М. Маслов, З. Пятакова
Выпускающий редактор: И. Фурлетова
Адрес редакции: 119296 Москва, Ленинский проспект, 64