Uzbek Journal of Physics
Vol.21(№1) 2019 PP.62-64

СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ ФУЛЛЕРЕНЫ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В БИОФИЗИКЕ

М.Х. Самадов, З. Каноков

Национальный университет РУз, Ташкент, Узбекистан
(Получена 25.05.2018)

Ушбу ишнинг мақсади C_{60} типдаги фуллеренларнинг ўта-ўтказувчанлик ҳолатига ўтиш температурасини Елиашберг тенгламалар тизимига асосан назарий ҳисоблашдан иборатдир. Фуллеренларнинг биофизика ва медицина соҳасида кенг қўлланилиши муҳокама қилинган.

На основе системы уравнений Элиашберга проведены расчеты температуры сверхпроводящего перехода фуллерена C_{60}. Обсуждается применение сверхпроводящих материалов в биофизике и медицине.

On the basis of the Eliashberg equation's system the temperature of superconducting transition of fullerene C_{60} is calculated. An application of the superconducting material in the field of biophysics and medicine is discussed.

Фуллерены – это большое семейство углеродных молекул, в которых атомы углерода располагаются в вершинах выпуклых многогранников, составленных из шестиугольных и пятиугольных граней. Пятиугольники необходимы для образования криволинейной поверхности, примером которой является сфера. Согласно теории многогранников, разработанной Л. Эйлером, число фуллеренов теоретически неограниченно. Простейший фуллерен состоит из 20 атомов углерода (C_{20}). Далее идут C_{24}, C_{26},…,C_{60}, C_{70} и более крупные фуллерены до (C_{200} и выше). Самой устойчивой молекулой из семейства фуллеренов является бакминстер-фуллерен, содержащий 60 атомов углерода [1-4].

Целью настоящего сообщения является вычисление температуры сверхпроводящего перехода фуллерена C_{60} на основе системы уравнений Элиашберга.

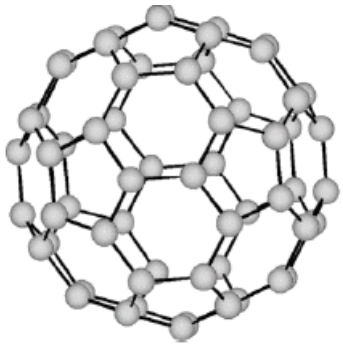


Рис. 1. Структура молекулы фуллерена C_{60}.

Молекула C_{60} имеет форму усечённого икосаэдра, в котором 12 пятиугольных граней и 20 шестиугольных [2]. В вершинах этого многогранника находятся атомы углерода (рис. 1). Параметры сверхпроводящего состояния одинаковы по всем кристаллографическим направлениям, что является следствием высокой симметрии кубической кристаллической решетки фуллерена [3].

Для оценки температуры сверхпроводящего перехода обычно используются уравнения Элиашберга [5]. Стандартный

метод расчета температуры сверхпроводящего перехода – это решение линеаризованной системы уравнений Элиашберга, которые можно представить в виде

$$\Delta(\omega) = \frac{1}{Z(\omega)} \int_{\Delta_0}^{\omega_C} d\nu \,\mathrm{Re}\left\{ \frac{\Delta(\nu)}{\sqrt{\nu^2 - \Delta^2}} \right\} [K^+(\omega,\nu) - \mu^*],$$

$$[1 - Z(\omega)]\omega = \int_{\Delta_0}^{\infty} d\nu \,\mathrm{Re}\left\{ \frac{\nu}{\sqrt{\nu^2 - \Delta^2}} \right\} K^-(\omega,\nu),$$

$$K^{\pm}(\omega,\nu) = \int_0^{\omega_0} d\omega_q \alpha^2 F(\omega_q) \left\{ \frac{1}{\omega_q + \nu + \omega + i\delta} \pm \frac{1}{\omega_q + \nu - \omega - i\delta} \right\}.$$

Здесь $\Delta(\omega)$ – частотно-зависящий параметр порядка, $Z(\omega)$ – функция перенормировки, ν – нормировочный параметр, δ – дельта-функция. Параметр порядка $\Delta(\omega)$ отличен от нуля только в сверхпроводящем состоянии, $Z(\omega)$ отлична от нуля в нормальном и сверхпроводящем состоянии и описывает перенормировку электронного спектра. Эта функция в нормальном состоянии имеет вид $Z(0) = 1 - \lambda$, где $\lambda = 2\int_0^{\omega_0} d\omega \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}$ – константа электрон-фононной связи, $\alpha^2 F(\omega)$ – спектральная плотность электрон-фононного взаимодействия. Фактически, эта функция определяет значение критической температуры сверхпроводника. Аналитическая аппроксимация решений системы уравнений Элиашберга дает искомое выражение для T_c

$$T_c = \frac{\omega_{\ln}}{1.2} \exp\left[\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)} \right].$$

Здесь $\omega_{\ln} = \frac{2}{\lambda}\int_0^{\infty} d\omega \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} \ln\omega$ – фононная частота, $\mu^* = \frac{\mu}{1 + \mu \ln\left(\varepsilon_F / \omega_{\ln}\right)}$ – кулоновский псевдопотенциал. Таким образом, задача вычисления температуры сверхпроводящего перехода T_c сводится к расчету величин λ, $\omega_{\ln}$ и μ^*. Для типичных значений параметров $\omega_{\ln}$ = 1003 K, λ = 1.2 и μ^* = 0.25 мы имеем для температуры сверхпроводящего перехода T_c =19.5 K.

Например, температура сверхпроводящего фазового перехода фуллеренов щелочных металлов в зависимости от постоянной решетки меняется от ~30 К до 40 К и выше.

Открытие фуллеренов и их уникальное строение вызвали большой интерес у биологов и фармацевтов. Сегодня учёные большое внимание уделяют проблеме использования производных фуллерена в медицине и фармакологии. Обсуждается идея создания противораковых препаратов на основе «фаршированных» фуллеренов, внутри которых находятся радиоактивные изотопы [4]. Хорошо известно, что практически любое заболевание сопровождается избыточным образованием в организме свободных радикалов. Их накопление порождает множество отрицательных биологических процессов. Такое состояние называется оксидантным стрессом. Фуллерены способны с ним бороться. Например, гидроксилированный фуллерен $C_{60}(OH)_{26}$, хорошо растворимый в воде, обладает

значительно более высокой антиоксидантной активностью, чем витамины Е и А. В отличие от этих одноразовых антиоксидантов (одна молекула витамина уничтожает только одну радикальную частицу) фуллерены являются многоразовыми: они собирают на своей поверхности несколько радикалов, которые самоуничтожаются. Фуллерены – эффективная ловушка для свободных радикалов.

ЛИТЕРАТУРА

1. H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien et al., Nature **318**, 162 (1985).
2. А.В. Елецкий, Б.Н. Смирнов. Фуллерены и структуры углерода (Москва, 1995).
3. А.А. Лысенко, О.В. Асташкина, А.А. Петров. Фуллерен – аллотропная модификация углерода (Москва, 2006).
4. А.Я. Борщевский, И.Н. Иоффе, Л.Н. Сидоров, С.И. Троянов, М.А. Юровская. Фуллерены (Москва, 2007).
5. E.L. Wolf. Principles of Electron Tunneling Spectroscopy (Oxford University Press, London, 1985.