

Влияние циклодекстрина на распределение по размерам наночастиц Au, стабилизированных рутином

© Голованова Стелла Александровна, Садков Анатолий Петрович
и Шестаков Александр Федорович*[†]

*Институт проблем химической физики Российской Академии Наук,
пр. ак. Семенова, 1. г. Черноголовка, 142432. Московская обл. Россия.
Тел.: (986) 522-51-63. E-mail: a.s@icp.ac.ru*

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: золото, рутин, альфа-циклодекстрин, бета-циклодекстрин, синтез, наночастицы, нанокластеры, квантово-химическое моделирование, метод функционала плотности.

Аннотация

Изучено влияние α - и β -циклодекстрина на образование наночастиц в системе HAuCl_4 рутина. Исследован диапазон концентраций циклодекстрина от $2.5 \cdot 10^{-4}$ М до $5 \cdot 10^{-3}$ М и влияние последовательности введения исходных компонентов. Обнаружено, что в присутствии α - и β -циклодекстрина происходит уменьшение гидродинамического радиуса мелких наночастиц золота с 2.5 нм до 1 нм. Делается вывод о том, что стабилизированные наночастицы золота находятся во взаимодействии как с циклодекстрином, так и с рутином. В исследуемых системах молекулы циклодекстрина вызывают ассоциацию более крупных наночастиц золота, по-видимому, за счет водородных связей между сахарными остатками рутина в лигандной оболочке наночастиц и циклодекстрина. Образование агрегированных наночастиц затрудняет диагностику размера частиц методом динамического рассеяния света. Поэтому для уточнения полимодальных распределений частиц по размерам в исходных растворах использовано центрифугирование. С помощью расчетов методом функционала плотности РВЕ изучено строение супрамолекулярных нейтральных и положительно заряженных аддуктов кластера Au_{13} с β -циклодекстрином, моделирующего частично окисленный кластер Au_{13}L из-за наличия лигандной оболочки L. Проведенное квантово-химическое исследование показывает, что при стабилизации кластера Au_{13} молекулой β -циклодекстрина около половины атомов золота способны координировать дополнительные лиганды из раствора. Рутиновые лиганды, обладающие несколькими хелатными узлами, при связывании с поверхностными атомами кластера Au_{13} из-за стерических препятствий не могут обеспечить полное покрытие всех атомов наружной части кластера. Свободные поверхностные атомы золота являются хорошими кандидатами для активации субстратов, в том числе и легких алканов. Однако продукты деструкции рутина, образующиеся при его глубоком окислении под действием HAuCl_4 , могут блокировать доступные активные центры на поверхности стабилизированного нанокластера Au. Обсуждается изменение методики синтеза нанокластеров золота, стабилизированных циклодекстрином для получения на них каталитических центров для активации C-H связей легких алканов в мягких условиях.