

НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

УДК 530.145:541.27 + 539.21.072:546.5

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КЛАСТЕРОВ СЕРЕБРА С КВЕРЦЕТИНОМ

Яна Андреевна Громова¹, Александр Юрьевич Ермилов¹, Татьяна Игоревна Шабатина^{1,2}

¹ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

² Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Автор, ответственный за переписку: Яна Андреевна Громова, chemyaninka@mail.ru

Аннотация. Методом химического полиольного восстановления получены наночастицы серебра (AgNPs), стабилизированные кверцетином (Que). В основе оптимизации синтеза гибридной системы лежат варьирование времени нагревания, мольное соотношение AgNO_3 : Que и pH. Контроль формирования наночастиц серебра осуществляли методом УФ-видимой спектроскопии. Методом функционала плотности в параметризации B3LYP5 рассчитаны структуры малых кластеров серебра (Ag , Ag_2 , Ag_3) и их взаимодействие с молекулой кверцетина. Оценены тенденции в геометрическом строении и энергии взаимодействия Ag_n с кверцетином в зависимости от размера кластера и места координации. Показано, что с ростом размера металлического кластера энергия диссоциации увеличивается. Предпочтительным является координация атомов Ag по карбонильному кислороду, сопряженному с бензоильным фрагментом кверцетина в кольце А. Наибольшая энергия связывания получена для системы Ag_3 -Que (10,3 ккал/моль).

Ключевые слова: наночастицы серебра, кластеры серебра, кверцетин, полиольное восстановление, метод функционала плотности

DOI: 10.55959/MSU0579-9384-2-2026-67-4-235-246

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, тема № 121031300176-3 и при финансовой поддержке Программы развития Московского университета–2024 в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова № АААА-А21-121011590090-7.

Для цитирования: Громова Я.А., Ермилов А.Ю., Шабатина Т.И. Взаимодействие кластеров серебра с кверцетином // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2026. Т. 67. № 4. С. 235–246.

ORIGINAL ARTICLE

INTERACTION OF SILVER CLUSTERS WITH QUERCETIN

Yana A. Gromova¹, Alexander Yu. Ermilov¹, Tatyana I. Shabatina^{1,2}¹ Lomonosov Moscow State University, Faculty of Chemistry, Moscow, Russia² Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia**Corresponding author:** Yana A. Gromova, chemyaninka@mail.ru

Abstract. Silver nanoparticles (AgNPs) stabilised with quercetin (Que) were obtained by chemical polyol reduction. The optimisation of the hybrid system synthesis was based on varying the heating time, the molar ratio of AgNO₃–Que, and the pH. The formation of AgNPs was monitored using UV-visible spectroscopy. The structures of small silver clusters (Ag, Ag₂, Ag₃) and their interaction with the quercetin were calculated using density functional theory (DFT) with B3LYP5 parameterisation. Trends in the geometric structure and interaction energy of Ag_n – quercetin were evaluated depending on the cluster size and coordination site. It was shown that the dissociation energy increases with the growth of the metal cluster size. The preferred coordination of Ag atoms is via the carbonyl oxygen conjugated with the benzoic fragment of quercetin in ring A. The highest binding energy was obtained for the Ag₃ – Que system (10.3 kcal/mol).

Keywords: silver nanoparticles, silver clusters, quercetin, polyol reduction, density functional theory

Financial Support. The work was carried out as part of the state assignment of Lomonosov Moscow State University, No. 121031300176-3 and with the financial support of the Moscow University Development Programme–2024 as part of the state assignment of Lomonosov Moscow State University No. AAAA-A21-121011590090-7.

For citation: Gromova Ya.A., Ermilov A.Yu., Shabatina T.I. Interaction of silver clusters with quercetin // Vestn. Mosk. un-ta. Ser. 2. Khimiya. 2026. T. 67. № 4. S. 235–246.

Гибридные системы типа core-shell являются одними из самых перспективных объектов исследования в последние десятилетия. Это обусловлено, с одной стороны, их физико-химическими свойствами, более интересными, по сравнению с индивидуальными компонентами, а с другой стороны, широким спектром применения. Кроме того, синтетические возможности получения гибридных систем фактически не ограничены, начиная от выбора методики синтеза, заканчивая использованием конкретного типа наночастиц, а также природы и структуры лиганда [1].

Одним из направлений исследований нашей научной группы является создание гибридных систем на основе наночастиц серебра. На данный момент мы активно развиваем исследования в области получения наночастиц серебра, стабилизированных лигандом кверцетином.

Кверцетин – природное биохимическое вещество класса флавоноидов, растительный поли-

фенол, известный также как «витамин Р». Этот лиганд интересен тем, что его можно выделить из множества растительных экстрактов либо в форме «агликона» (чистый кверцетин), либо в форме его «гликозидов» (например, рутин) [2]. В литературе для синтеза наночастиц различных металлов и их оксидов зачастую применяют растительные экстракты, основным компонентом которых является кверцетин [3]. В качестве исходного растительного сырья активно используют различные плоды и ягоды (клюква, брусника, черника, смородина, виноград), представители семейств луковичных (шалот, лук репчатый, каперсы), листовые и крестоцветные (капуста, шпинат), цветки и травы (зверобой, гречиха, софора японская), кожуру и выжимки граната, винограда, яблока, луковой шелухи. Более подробно с составами растительных экстрактов можно ознакомиться в работе [4]. Однако следование тренду «зеленой химии» не всегда оправдано

ввиду сложности и разнообразия состава растительных объектов.

Благодаря выраженным антиоксидантным, противовоспалительным, антимикробным и противоопухолевым свойствам кверцетина и его металлические комплексы используют в фармацевтике, нутрицевтике, косметологии и пищевой промышленности [2]. Сочетание наночастиц серебра с кверцетином может привести к созданию новых уникальных наноматериалов. Ожидается, что такие системы могут обладать усиленными антимикробными свойствами, а также иметь интересные оптические, структурные и размерные показатели. Гибридные системы на основе наночастиц серебра, стабилизированных кверцетином, безусловно, являются перспективными материалами, особенно в областях направленной доставки лекарств и создания сенсорных материалов для биомедицинских задач.

Цель настоящей исследовательской работы – получение наночастиц серебра, стабилизированных кверцетином, оптимизация условий синтеза, а также оценка тенденции в геометрическом строении и энергии взаимодействия металлических кластеров серебра с лигандом в зависимости от его размера и места координации.

Экспериментальная часть и методика расчета

Синтез наночастиц серебра проводили методом химического полиольного восстановления с лигандом кверцетином в водно-спиртовом растворе. В качестве источника ионов серебра использовали азотнокислое серебро (AgNO_3 ; 99,99%; АО «Ленреактив», Санкт-Петербург, Россия), роль восстановителя ионов серебра и стабилизатора выполнял кверцетин ($\text{C}_{15}\text{H}_{10}\text{O}_7$, («ч.»), АО «Ленреактив», Санкт-Петербург, Россия). Нитрат серебра растворяли в необходимом количестве дистиллированной воды, кверцетин – в этиловом спирте ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, 96%). Далее смешивали 20 мл водного раствора нитрата серебра с 1 мл спиртового раствора кверцетина, активированного 2–3 каплями 1 М раствора едкого натра (NaOH , «ч.д.а.», «Русхим», Москва, Россия). Реакционную смесь помещали на магнитную мешалку (200–1500 об/мин, 200 Вт, Joanlab, Китай) для интенсивного перемешивания при комнатной температуре. Для оценки влияния длительности нагревания на оптические и размерные свойства наночастиц серебра в серии синтезов перемешивание реакционной смеси проводили при нагревании до 130–140 °С. Для оптимизации условий

синтеза варьировали такими параметрами, как мольное соотношение AgNO_3 : Que (8:1, 4:1: 1:1, 1:2), pH (7, 9) и длительность нагревания реакционной смеси.

Регистрацию УФ-спектров плазмонного поглощения наночастиц серебра проводили в диапазоне длин волн 300–800 нм при комнатной температуре, спектр поглощения кверцетина в диапазоне длин волн 200–600 нм на спектрофотометре марки Specord M40, фирмы Carl Zeiss Jena (Германия).

Высокоточный анализатор Nanobrook Omni фирмы Brookhaven Instruments (США) использовали для определения среднего гидродинамического диаметра гибридных НЧС в режиме метода динамического рассеяния света при комнатной температуре под углами рассеяния 15, 90, 173 град. и диодным лазером 40 мВт. Для анализа использовали раствор гибридных НЧС в воде, предварительно изменив настройки программы с учетом особенностей аналита. Для сферических AgNPs показатель преломления составляет 0,135, для воды – 1,330.

Для расчета геометрического строения кластеров серебра (Ag , Ag_2 , Ag_3) с кверцетином был выбран метод функционала плотности в параметризации B3LYP5. На всех атомах (Ag , C , O , H) выбран атомный базис def2-svp [5]. Для описания атомов серебра использовано приближение псевдопотенциала Штутгартской группы в варианте ECP28MDF [5]. По результатам расчетов были найдены оптимальные геометрические структуры, подтвержденные отсутствием мнимых частот в стационарных точках. Все расчеты выполнены с помощью программы GAMESS-US [6].

Результаты и их обсуждение

Синтез наночастиц серебра, стабилизированных кверцетином

Получение гибридных систем является одним из ключевых направлений в современной нанохимии, материаловедении и биотехнологиях. Создание систем core-shell позволяет получать новые материалы с заданными физико-химическими свойствами: размер, морфология, оптическая активность, адсорбционные и разделительные свойства, спектральные свойства. Получение таких «умных» материалов зачастую регулируется на этапе осуществления синтеза.

Интересы нашей научной группы и ранее были связаны с получением AgNPs, стабилизированных различными органическими лигандами.

Потребность в создании материалов для биомедицинских задач стимулирует поиск новых лигандов, проявляющих выраженный терапевтический эффект. Одним из таких природных лигандов является флавоноид кверцетин. В литературе представлены несколько работ, в которых описаны результаты экспериментов по синтезу и исследованиям физико-химических свойств систем AgNPs–Que [7–10]. В большинстве из них кверцетин был экстрагирован из растительного экстракта [1, 3]. Безусловно, подходы «зеленой химии» являются актуальными в научных исследованиях для получения новых материалов, в том числе и для серебряных наночастиц. Однако, как правило, состав таких экстрактов очень сложен и содержит множество органических молекул, принадлежащих к разным классам и имеющих отличные друг от друга структурные особенности. В таком случае довольно затруднительным является ответ на вопрос, какой компонент растительного экстракта восстанавливает ионы металла из соли, а какой стабилизирует формирующиеся металлические агрегаты.

В настоящем исследовании мы применяли метод классического химического восстановления. Как известно из литературы, одним из вариантов химического восстановления ионов серебра из прекурсора является полиольный синтез [7]. В работе были использованы азотнокислое серебро в водном растворе и этанольный раствор кверцетина в качестве восстановителя и стабилизирующего агента. Синтез является простым

и экспрессным, не требует сложного оборудования и работы с токсичными растворителями. Формирование AgNPs контролировали по двум характерным признакам: изменение цвета раствора от светло-желтого до темно-коричневого и появление полосы плазмонного резонанса (ППР) серебра в УФ-спектрах поглощения в видимой области.

На рис. 1, *a* представлена структурная формула кверцетина. В его молекуле можно выделить три структурных фрагмента: кольцо А – бензоильная система, кольцо В – циннамоильная система, С – гетероцикл. Так как в структуре лиганда содержатся несколько потенциальных «окисляемых центров», необходимо понимание того, какие функциональные группы принимают участие в восстановлении Ag^+ и какие структурные фрагменты стабилизируют формирующиеся кластеры серебра.

Из литературных данных и на основании теоретических рассуждений можно сделать вывод, что именно –ОН-группы в *o*-положении циннамоильного фрагмента кверцетина ответственны за восстановление ионов серебра из соли – пирокатехиновый фрагмент кольца В (углероды C_3 и C_4) окисляется до хинонового. Восстановление идет по –ОН-группам, так как они более стерически доступны, в результате образуется наиболее энергетически стабильна хиноновая система [7]. Ниже представлена схема восстановления Ag^+ из нитрата серебра с помощью кверцетина, включающая 3 стадии.

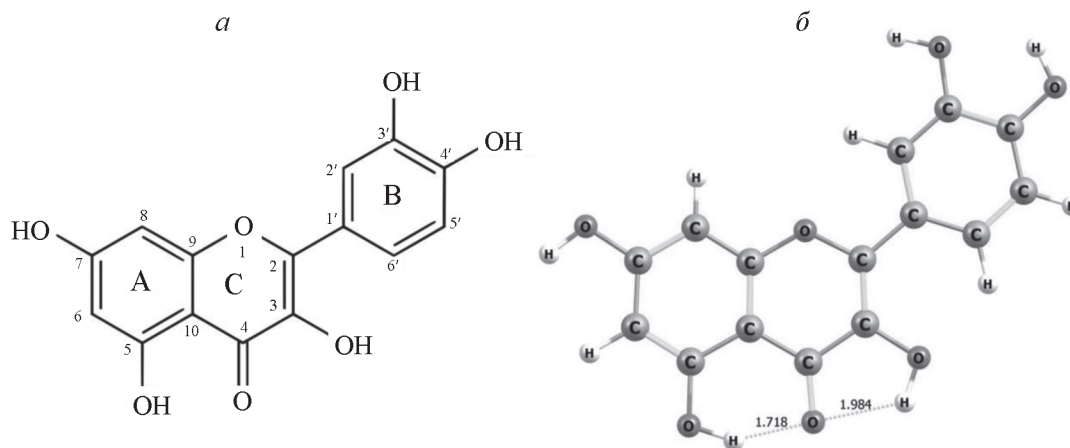
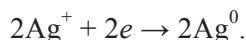


Рис. 1. Структурная формула кверцетина (*a*); равновесная структурная формула кверцетина при оптимизации геометрии молекулы (*б*). Кольцо А – бензоильная система, кольцо В – циннамоильная система, С – гетероцикл

1. Окисление пирокатехинового фрагмента до хинонового. –ОН-группы в положениях 3' и 4' кольца В отдают 2 электрона:

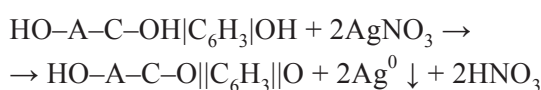


2. Восстановление ионов серебра. Ag^+ из $AgNO_3$ принимают электроны:



3. Образование наночастиц. Атомы серебра Ag^0 агрегируют, образуя нанокластеры. При этом оставшийся кверцетин адсорбируется на поверхности частиц, выполняя роль стабилизатора.

Полное уравнение можно схематично представить в следующем виде:



Следует отметить, что другие –ОН-группы (кольцо А) также могут принимать участие в восстановлении Ag^+ в условиях избытка исходной соли. Однако именно –ОН-группа бензоильного фрагмента (кольцо А) и карбонильный атом кислорода, сопряженный с кольцом А, являются основными донорными центрами (рис. 1, а). Поэтому, как правило, координация атомов металла проходит по бензоильной системе кверцетина.

Поскольку такие исследования проводили впервые важно было выявить оптимальные условия проведения синтеза. Для этого выделили три основных параметра для оптимизации: мольное соотношение $AgNO_3$ и Que, pH раствора кверцетина, время нагревания реакционной смеси. Была проведена серия синтезов при комнатной температуре и pH 7. В этом случае формирование наночастиц серебра не наблюдали. При активации

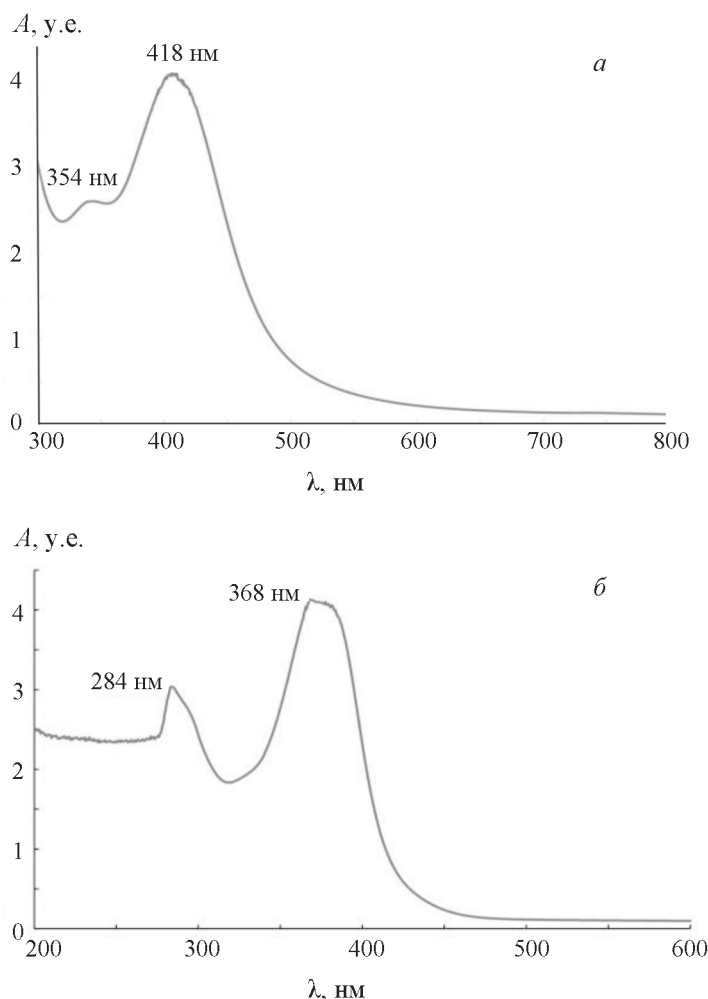


Рис. 2. Спектр плазмонного поглощения НЧС, стабилизированных кверцетином, при перемешивании, мольное соотношение $AgNO_3$: Que (1:1) (а); спектр поглощения кверцетина (б)

кверцетина 1 М раствором щелочи (рН 9) в УФ-спектрах были зафиксированы максимумы плазмонного поглощения при характерных для AgNPs длинах волн (410–430 нм). Стоит отметить, что при работе с О-содержащими лигандами ППР серебра лежит в диапазоне от 420 до 430 нм в зависимости от природы лиганда. Эти теоретические и экспериментальные данные находятся в согласии с полученными в рамках настоящего исследования [8, 9].

Еще одним важным параметром синтеза является мольное соотношение нитрата серебра и кверцетина в исходной реакционной смеси. Этот

параметр напрямую влияет на размер частиц AgNPs, а также плотность лигандной оболочки, что в свою очередь сказывается на положении ППР серебра в спектрах поглощения. Для оценки влияния этого параметра работали с четырьмя мольными соотношениями $\text{AgNO}_3 : \text{Que} = 8:1, 4:1, 1:1, 1:2$. В последнем случае (избыток лиганда) серия синтезов оказалась безуспешной – наблюдали образование ярко-розового раствора, в спектрах поглощения отсутствовала ППР. Результат можно объяснить следующим образом. Наличие большого числа –ОН-групп позволяет лиганду образовать молекулу-ассоциат

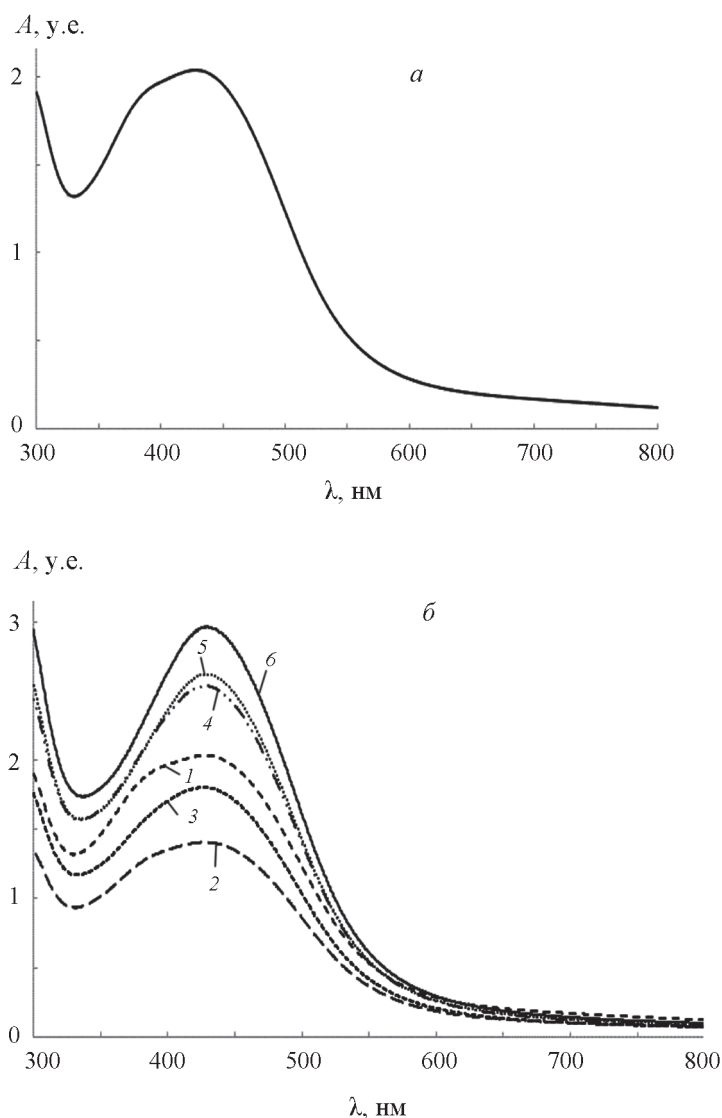


Рис. 3. Спектр плазмонного поглощения НЧС, стабилизированных кверцетином, при перемешивании (а); спектры плазмонного поглощения НЧС, стабилизированных кверцетином, в динамике нагревания, мин (1 – 0, 2 – 15, 3 – 30, 4 – 45, 5 – 60, 6 – 75) (б). Мольное соотношение $\text{AgNO}_3 : \text{Que} = 4:1$

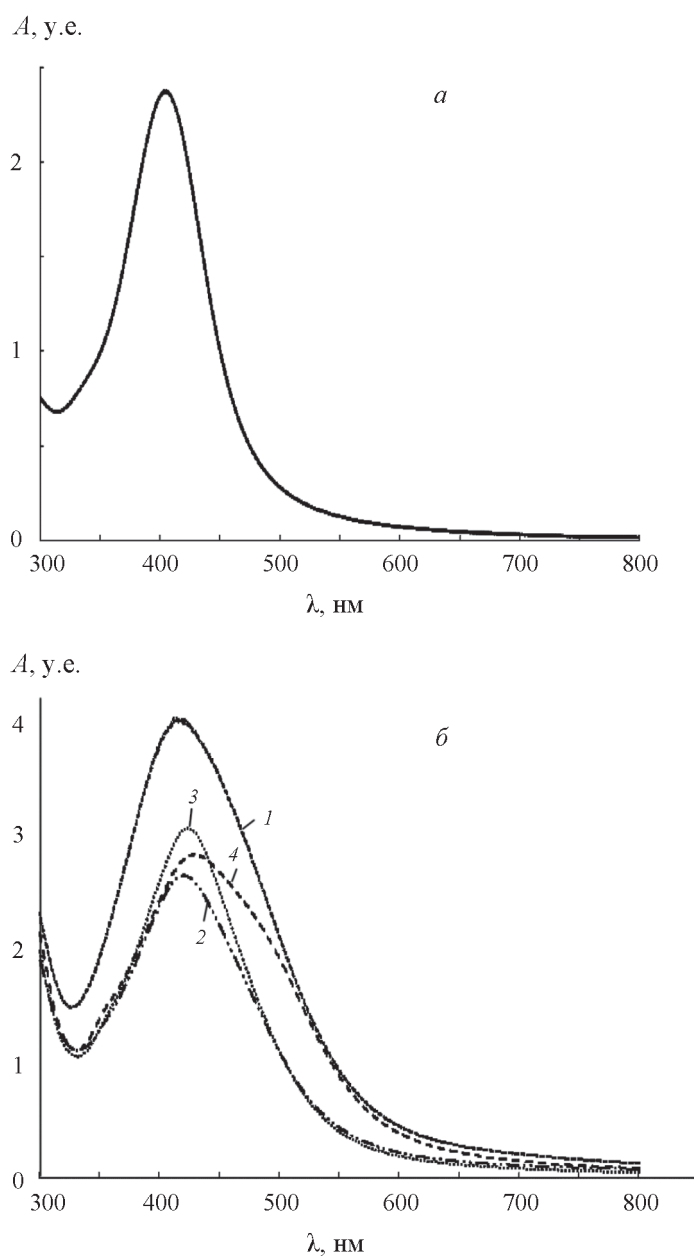


Рис. 4. Спектр плазмонного поглощения НЧС, стабилизированных кверцетином, при перемешивании (а); спектры плазмонного поглощения НЧС, стабилизированных кверцетином, в динамике нагревания (1 – 0, 2 – 15, 3 – 30, 4 – 45) (б). Мольное соотношение $\text{AgNO}_3 : \text{Que} = 8:1$

по причине формирования внутримолекулярных водородных связей, что стерически затрудняет стабилизацию наночастиц. При мольном соотношении 1:1 восстановление и стабилизация НЧС проведена успешно. Как видно из рис. 2, а, где представлен спектр поглощения AgNPs, максимум поглощения находится при 418 нм. Однако на спектре явно наблюдается еще один максимум поглощения при 354 нм, относящийся к кверцетину (рис. 2, а). Как типичный представитель флавоно-

идов кверцетин имеет два максимума поглощения: коротковолновый и длинноволновый. Поглощение в диапазоне 250–270 нм в спиртовом растворе обусловлено наличием бензоильной системы – кольца А и сопряжением с гетероциклом С. Это переходы типа $\pi \rightarrow \pi^*$ в этой части молекулы. Поглощение при 370–380 нм связано с более протяженной циннамоильной системой (кольцо В и сопряжение с гетероциклом С) (рис. 2, б). Результат можно интерпретировать следующим образом: так как

в спектре поглощения наблюдается «плечо» при 354 нм, есть основание полагать, что восстановление Ag^+ произошло не полностью, поскольку именно группы $-\text{OH}$ в *o*-положениях кольца В ответственны за протекание этого процесса [10].

Далее была проведена серия синтезов при мольном соотношении AgNO_3 и Que, равном 4:1. Максимум поглощения в этом случае составил 428 нм (рис. 3, а). Было интересно оценить влияние времени нагревания реакционной смеси на смещение ППР серебра. Была проведена серия экспериментов, в которой каждый раз увеличивали время нагревания на 15 мин. Для данного мольного соотношения сильного смещения ППР не наблюдалось: 428 нм при перемешивании без нагревания, 433 нм при перемешивании и нагревании до 75 мин (рис. 3, б).

Более интересные результаты наблюдали для мольного соотношения $\text{AgNO}_3 : \text{Que} = 8:1$. В условиях перемешивания реакционной смеси и при отсутствии нагревания максимум поглощения зафиксирован при 419 нм (рис. 4, а). Нагревание до 45 мин приводит к смещению ППР до 429 нм, т.е. наблюдаем батохромный сдвиг на 10 нм (рис. 4, б). Результат можно объяснить тем, что при нагревании происходит ускорение восстановления Ag^+ и Оствальдовского созревания, мелкие частицы растворяются, крупные растут, т.е., вероятно, частицы AgNPs агрегируют. Кроме того, при нагревании лигандная оболочка уплотняется и возрастает ее диэлектрическая проницаемость, меняется состав адсорбционного слоя на поверхности атомов серебра. Сочетание этих факторов, как мы полагаем, дает сдвиг в красную область спектра. В пользу агрегации серебряных наночастиц свидетельствует и уменьшение интенсивности поглощения при температуре. Падение интенсивности поглощения может быть также связано с возможным окислением остаточных $-\text{OH}$ -групп кверцетина до карбонильных соединений, что ухудшает его стабилизирующую способность.

Для более полной и достоверной интерпретации полученных результатов в рамках дальнейших исследований необходимо получить электронные микрофотографии образцов для оценки среднего размера AgNPs , а также оценить ζ -потенциал поверхностных атомов серебра до и после нагревания. На основании полученных результатов можно считать, что оптимальными условиями синтеза являются: $\text{AgNO}_3 : \text{Que} = 4:1$, перемешивание без нагревания с предварительной активацией лиганда щелочью (рН 9). Последнее способствует депротонизации

$-\text{OH}$ -групп и лучшей стабилизации наночастиц серебра. Средний гидродинамический диаметр системы $\text{AgNPs}-\text{Que}$ по данным динамического светорассеяния составил $(52,7 \pm 1,5)$ нм для данного мольного соотношения.

Взаимодействие кластеров серебра с кверцетином: результаты DFT-расчетов

Для более глубокого понимания механизма стабилизации наночастиц серебра кверцетином в нашей работе были осуществлены расчеты по методу DFT. Основной задачей стало выявление «места координации» атомов серебра в кверцетине, а также оценка прочности образующихся комплексов на основании рассчитанных значений энергий диссоциации.

Результаты расчетов по кластерам серебра (димер Ag_2 и тример Ag_3) были ранее представлены в работах [11–13]. Равновесная структура кверцетина приведена на рис. 1, б. Как видно из рисунка, структура лиганда дополнительно стабилизирована двумя внутримолекулярными водородными связями. В молекуле кверцетина имеется несколько атомов кислорода, которые могут участвовать в координации металлических кластеров. Как было упомянуто ранее, координация атомов серебра идет по кольцу А (бензоильный фрагмент в молекуле кверцетина, сопряженный с карбонильной группой кольца С через общую π -систему). Кверцетин имеет два донорных центра, которые отвечают за координацию атомов серебра: 3-ОН-группа кольца А и карбонильный атом $-\text{O}$ в гетероцикле. Ниже представлены результаты DFT-расчетов кластеров серебра разного размера с кверцетином. В работе рассмотрены только структуры и энергии комплексов Ag с наиболее стабильными изомерами кверцетина.

Структура комплекса моноатома серебра с молекулой лиганда приведена на рис. 5. Хорошо видно, что связь атома металла с карбонильным атомом кислорода образуется за счет ослабления одной из внутримолекулярных водородных связей кверцетина. Расстояние $\text{Ag}-\text{O}$ составляет 2,733 Å, энергия диссоциации комплекса на атом металла и свободный кверцетин равна 2,3 ккал/моль. Относительно низкая прочность связи $\text{Ag}-\text{O}$ может быть связана с разрушением внутримолекулярной водородной связи исходного кверцетина.

Структура более устойчивого комплекса Ag_2-Que приведена на рис. 6. Димер серебра координируется к тому же карбонильному атому

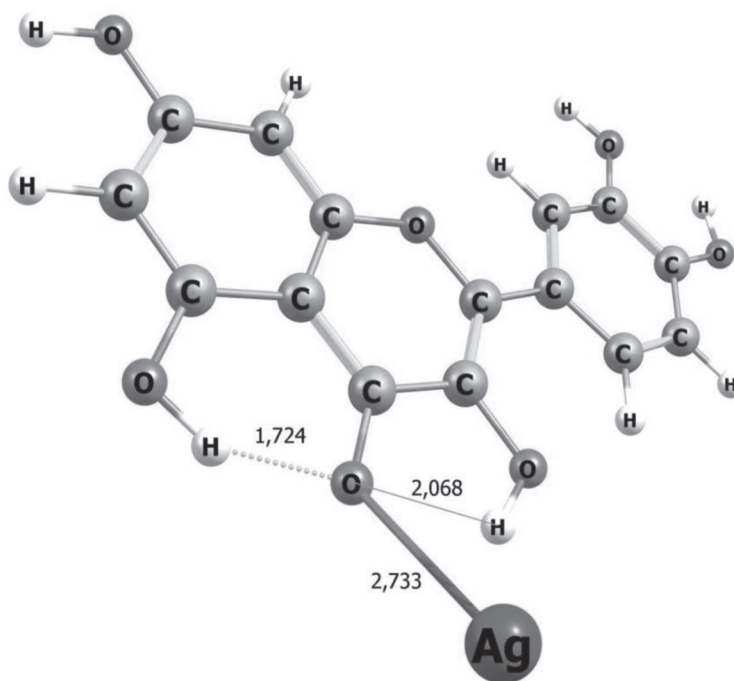


Рис. 5. Структура комплекса Ag-Que

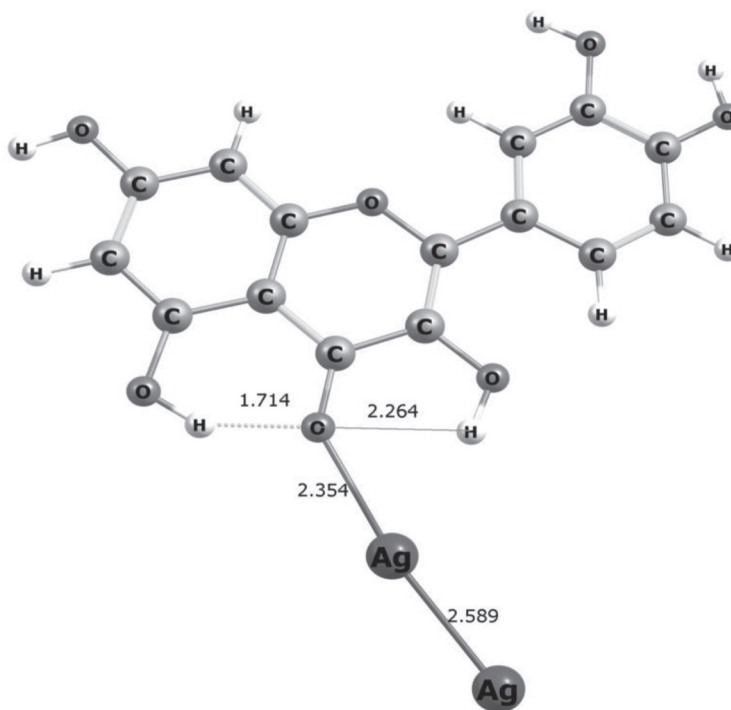


Рис. 6. Структура комплекса Ag₂-Que

кислорода, что и в системе Ag-Que. При этом расстояние Ag-O существенно меньше (2,354 Å). Структура комплекса близка к плоской, однако система имеет симметрию C_1 . Расчет комплекса в симметрии C_s приводит к появлению мнимой частоты. Энергия диссоциации комплекса составля-

ет 8,14 ккал/моль, а у аналогичного плоского изомера лишь символически выше – 8,13 ккал/моль.

Для комплекса тримера серебра (рис. 7, а) расстояние Ag-O составило 2,360 Å, что фактически сопоставимо с расстоянием в комплексе с димером (2,354 Å). Однако координация кластера Ag₃

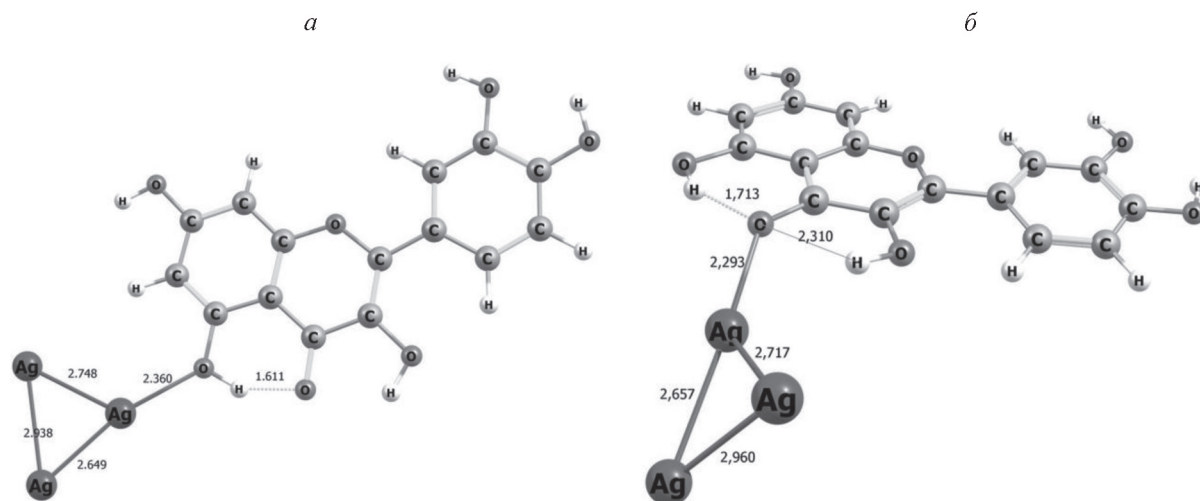


Рис. 7. Структура комплекса $\text{Ag}_3\text{-Que}$ при координации атомов серебра к гидроксильному атому кислорода бензоильного фрагмента А (*а*); структура комплекса $\text{Ag}_3\text{-Que}$ при координации атомов серебра к карбонильному атому кислорода, сопряженному с бензоильной системой кверцетина (*б*)

происходит к кислородному атому -OH -группы кольца А, причем комплекс имеет плоское строение с симметрией Cs . Энергия диссоциации комплекса составила 9,6 ккал/моль. Была также рассчитана структура тримера серебра с лигандом с меньшей энергией – энергия диссоциации составила 10,3 ккал/моль. В этом комплексе (рис. 7, *б*) кластер Ag_3 координируется к карбонильному атому кислорода, как и в случае систем Ag-Que и $\text{Ag}_2\text{-Que}$. Найденная структура имеет неплоское строение, треугольник Ag_3 повернут относительно связи Ag-O и выходит из плоскости молекулы кверцетина.

На основании экспериментальных данных и расчетов по методу DFT можно предложить следующий механизм стабилизации наночастиц серебра: в водно-спиртовом растворе формирование AgNPs протекает с неоднородной микросольватацией. Стабилизация осуществляется за счет адсорбционно-координационного «закрепления» лиганда на поверхности AgNPs через кислородсодержащие центры кольца А молекулы кверцетина, формирующего органическую оболочку.

Полученные значения энергий диссоциации комплексов подтверждают тенденцию роста энергии связывания кверцетина с увеличением размера металлического кластера. Аналогичная тенденция наблюдалась нами ранее в расчетах комплексов кластеров серебра с различными органическими лигандами (диоксином, холе-

стерином и тиохолестерином) [10, 11]. В целом, полученные экспериментальные данные находятся в согласии с теоретическими рассуждениями, основанными на структурных особенностях молекулы кверцетина, и литературными данными [14]. В дальнейшем мы планируем провести расчеты методом DFT для икосаэдрического кластера Ag_{13} с кверцетином, а также оценить энергии диссоциации комплексов кластеров Ag разного размера с окисленной формой кверцетина.

Выводы

В работе показано, что полиольный синтез AgNPs в присутствии кверцетина является управляемым и воспроизводимым подходом к формированию устойчивых наноструктур. Установлено, что оптимальное мольное соотношение AgNO_3 и Que составляет 4:1, проведение реакции при комнатной температуре и pH 9 обеспечивает формирование стабильной суспензии наночастиц серебра. Согласно данным УФ-спектроскопии, максимум поглощения находится при 428 нм, что также свидетельствует о формировании преимущественно мелкодисперсных частиц с ограниченной агрегацией. Согласно методам DFT, наиболее стабильной является система $\text{Ag}_3\text{-Que}$, в которой координация происходит через карбонильный атом кислорода, сопряженный с кольцом А в кверцетине. Такой механизм стабилизации обеспечивает эффективное

«экранирование» металлического ядра, снижает склонность к дальнейшей агрегации и повышает коллоидную устойчивость системы.

Результаты работы и перспективы дальнейших исследований полностью отвечают требованиям современной науки по своей значимости и

актуальности. Получение и исследование физико-химических свойств систем AgNPs–Que обосновано, они могут стать основой для разработки новых антибактериальных и антиоксидантных материалов, функциональных сорбентов, а также аналитических и сенсорных платформ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lafta M.Z., Al-Samarrai R.R.H., Bouaziz M. Green synthesis of silver and gold nanoparticles using quercetin extracted from *Arctium lappa* by HPLC: Characterization and estimation of antioxidant activity // *Results in Chemistry*. 2025. Vol. 13. Art. 102028 (DOI: 10.1016/j.rechem.2025.102028).
2. Baghel S.S., Shrivastava N., Baghel R.S., Agrawal P., Rajput S. A review of quercetin: Antioxidant and anticancer properties // *World Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences*. 2012. Vol. 1, No. 1. P. 146–160 (DOI: 10.5555/20123364781).
3. Batish S., Rajput J.K. Quercetin capped silver nanoparticles as an electrochemical sensor for ultrasensitive detection of chloramphenicol in food and water samples // *Journal of Food Composition and Analysis*. 2023. Vol. 122. Art. 105421 (DOI: 10.1016/j.jfca.2023.105421).
4. Шабатина Т.И., Боже А., Громова Я.А., Верная О.И., Мельников М.Я. Зеленый синтез наночастиц металлов // *Вестн. Моск. ун-та. Серия 2. Химия*. 2026. Т. 67. № 1. С. 3–27 (DOI: 10.55959/MSU0579-9384-2-2026-67-1-3-27).
5. EMSL Basis Set Library (Available at: <https://bse.pnl.gov/bse/portal>; <https://www.basissetexchange.org>).
6. Barca G.M.J., Bertonni C., Carrington L., et al. GAMESS version 2022 R2 (Available at: <https://www.msg.chem.iastate.edu/index.html>).
7. Chahardoli A., Hajmomeni P., Ghowsi M., Qalekhani F., Shokoohinia Y., Fattahi A. Optimization of quercetin-assisted silver nanoparticles synthesis and evaluation of their hemocompatibility, antioxidant, anti-inflammatory, and antibacterial effects // *Global Challenges*. 2021. Vol. 5, Art. 2100075 (DOI: 10.1002/gch2.202100075).
8. Abdel-Hakeem S.S., Abdel-Zaher Abdel-Samiee M., Khalaf M.M.A., Abed G.H. Impact of quercetin-conjugated silver nanoparticles on neuroinflammation, endothelial permeability, and pharmacokinetics in vivo against genotype T4 *Acanthamoeba polyphaga* // *J Drug Delivery Science and Technology*. 2025. Vol. 111. Art. 107116 (DOI: 10.1016/j.jddst.2025.107116).
9. Li X., Shi L., Song Z., Geng Z., Yan Y. The antibacterial activity and formation mechanism of quercetin-coated silver nanoparticles and protein complex // *Journal of Molecular Structure*. 2025. Vol. 1334. Art. 141878 (DOI: 10.1016/j.molstruc.2025.141878).
10. Andrade-Filho T., Ribeiro T.C.S., Del Nero J. The UV-vis absorption spectrum of the flavonol quercetin in methanolic solution: A theoretical investigation // *The European Physical Journal E*. 2009. Vol. 29. N. 3. P. 253 (DOI: 10.1140/epje/i2009-10485-7).
11. Gromova, Y.A., Ermilov, A.Y. & Shabatina, T.I. Biligand Complexes of Cholesterol and Thiocholesterol with Silver Nanoclusters: Experimental Data and DFT-Modeling // *Moscow Univ. Chem. Bull.* 2022. 77, 65–71 (DOI: 10.3103/S0027131422070069).
12. Соловьёв А.В., Громова С.А., Громова Я.А., Шабатин А.В., Морозов Ю.Н., Шабатина Т.И. Криохимическое формирование гибридных наночастиц на основе антибактериального лекарственного препарата диоксида и серебра методом низкотемпературной конденсации паров из газовой фазы // *Вестн. Моск. ун-та. Серия 2. Химия*. 2024. Т. 65. № 5. С. 363 (DOI: 10.55959/MSU0579-9384-2-2024-65-5-363-371).
13. Соловьёв А.В., Ермилов А.Ю., Морозов Ю.Н., Асташова И.В., Филиновский А.В., Шабатина Т.И. Исследование образования олигомеров диоксида в газовой фазе и среде CO₂ методом DFT // *Вестн. Моск. ун-та. Серия 2. Химия*. 2025. Т. 66. № 2. С. 93–102 (DOI: 10.55959/MSU0579-9384-2-2025-66-2-93-102).
14. Amalin Sobi M., Bindhu M.R., Usha D., Rajakrishnan R., Alfarhan A., Arokiyaraj S., Umadevi M. Molecular insights into quercetin-enhanced crystalline silver nanoparticles: Implications for breast cancer cell cytotoxicity and antibacterial action in *Kylinga nemoralis* // *Journal of Crystal Growth*. 2024. Vol. 637–638. Art. 127708 (DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2024.127708).

Информация об авторах

Яна Андреевна Громова – науч. сотр. кафедры химической кинетики химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, канд. хим. наук (chemyaninka@mail.ru);

Александр Юрьевич Ермилов – ст. науч. сотр. кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, канд. хим. наук (sanchik-u@yandex.ru);

Татьяна Игоревна Шабатина – зав. лабораторией химии низких температур кафедры химической кинетики, вед. науч. сотр. кафедры химической кинетики химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, профессор кафедры химии факультета фундаментальных наук МГТУ им. Н.Э. Баумана, докт. хим. наук (tatyashabatina@yandex.ru).

Вклад авторов

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Соблюдение этических стандартов

В данной работе отсутствуют исследования человека и животных.

Статья поступила в редакцию 10.01.2026;
одобрена после рецензирования 10.02.2026;
принята к публикации 05.03.2026.