DOI: 10.5281/zenodo.1493208

LCC - № Q300-390

ВИВЧЕННЯ ТОКСИЧНОСТІ ЗОЛОТИХ НАНОЧАСТОК

Анастасія Новікова[1], Валерій Карлюка[1]

[1] Херсонський національний технічний університет, Україна

Address for Correspondence: Валерій Карлюка, студент

Херсонський національний технічний університет

E-mail: valeriykarluka@gmail.com

Анотація. Робота присвячена аналізу й побудові моделей властивостей наночасток золота.

У роботі проводиться аналіз класифікації наночасток, зокрема, золота, їх способів отримання та основних властивостей.

На основі літературних даних проводиться аналіз ступеня токсичності та причин токсичності золотих наночасток.

В результаті аналізів будуються моделі властивостей наночасток золота.

Ключові слова: наночастки, золото, токсичність.

Abstract. The work is devoted the analysis and construction of models of gold nanoparticles' properties.

In work nanoparticles' classification analysis, in particular, gold, their ways of reception and the basic properties is carried out.

On the basis of the literary data the analysis of degree of toxicity and the reasons of gold nanoparticles' toxicity is carried out.

As a result of analyses models of gold nanoparticles' properties are under construction.

In recent years, the researchers have focused on the practical implementation of nanosized materials in biomedical technology. A special place among such materials used for diagnostic and therapeutic purposes, occupy nanoparticles of gold. To date, a significant number of works on their use in various fields of experimental pathology have been published. Nanoparticles of gold are used as carriers for the delivery of drugs, genetic material, antigens and as a medical or diagnostic tool for the treatment of tumors and rheumatoid arthritis, with a number of drugs being tested. The high efficiency of using nanosized

gold particles in the treatment of malignant neoplasms of the skin and its appendages by means of controlled local hyperthermia in the experiment was revealed.

Most researchers prefer parenteral administration of nanoparticles of gold in the body of animals and humans. But besides the positive, therapeutic effects of accumulation in skin epidermal tumor tissues, there are also negative ones. Accumulation in the internal organs (the liver, spleen, lungs, kidneys) leads to a violation of organ and tissue microcirculation, the development of dystrophic changes in them. The transdermal permeability of intact and damaged skin for golden nanoscale materials, with the exception of titanium oxide used for cosmetic purposes, has not been studied in practice. Intact skin is a natural barrier to nano-particles. Of the known compounds that enhance transdermal diffusion, including low molecular weight, at that time, the most known are sulfur organics such as dimethylsulfoxide and thiophanesulphoxide. They provide practically instantaneous percutaneous suction. Taking into account the high safety and accuracy of local administration of nanoparticles directly into the tissue of the epidermal tumor, and with the possible elimination of the side effects of accumulation in the internal organs, it is important to study the permeability of the skin for nanosheets of gold in combination with compounds that enhance their transdermal diffusion.

Keywords: nanoparticles, gold, toxicity.

Introduction. Актуальність обраної теми полягає в виявленні властивостей золотих наночасток, зокрема токсичних, оскільки наночастки золота насьогодні мають велике використання в діагностиці, терапії, пластичній хірургії людини.

Метою роботи є вивчення токсичності наночасток золота. Для досягнення мети роботи необхідно вирішити наступні завдання:

- провести аналіз класифікації й способів одержання наноматеріалів;
- вивчити властивості наноматеріалів, зокрема золотих наночасток;
- на основі проведених досліджень побудувати моделі, що відбивають властивості наночасток золота при зміні їх характеристик.

Objective. Об'єктом дослідження є процес зміни властивостей наночасток при зміні їх характеристик.

Предмет дослідження – моделі наночасток золота.

Materials and methods. Методи дослідження – математичний аналіз, системний аналіз, комп'ютерне моделювання.

В останні роки пильна увага дослідників прикута до практичного впровадження нанорозмірних матеріалів у біомедицинські технології. Особливе місце серед таких матеріалів, застосовуваних для діагностичних і терапевтичних цілей, займають наночастки золота. На цей

момент опубліковано значне число робіт з їхнього використання в різних галузях експериментальної патології. Наночастки золота використовують як носії для доставки лікарських речовин, генетичного матеріалу, антигенів і як лікарський або діагностичний засіб при терапії пухлин і ревматоїдного артриту.

Але деякі літературні данні проаналізовані нами говорять и про токсичний вплив наночасток, зокрема, золота.

Вплив нанозолота на організм залежить від способу його отримання: штучний або природний (рис. 1). Природними джерелами НЧ можуть бути діючі вулкани, лісові пожежі, вивітрювання гірських порід, мікрошар органічної поверхні. Штучні методи описані в роботі.

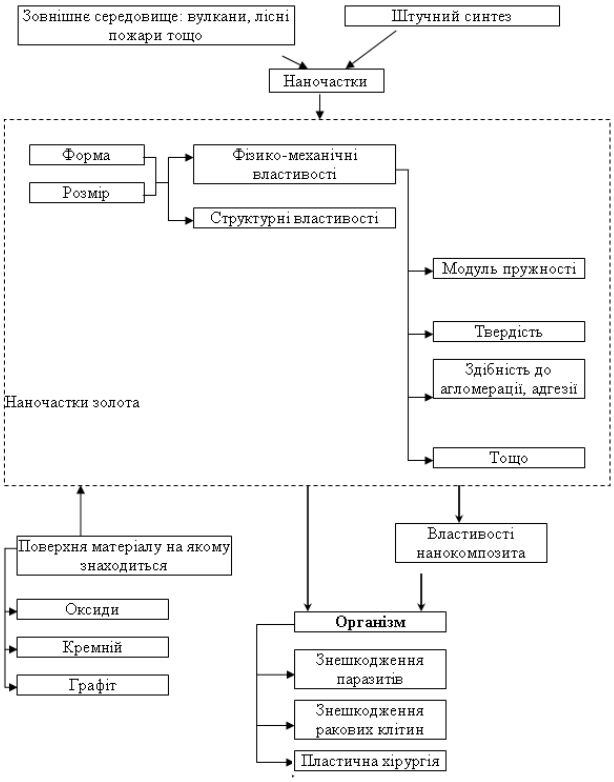

Рис. 1. Аналіз впливу наночасток золота на організм

Експериментальне дослідження наночасток є технічно складним і трудомістким завданням внаслідок малості розмірів даних об'єктів. Моделювання є альтернативним і перспективним способом вивчення нанооб’єктів і дуже актуальне. Важливим завданням є визначення фізико-механічних, структурних, кількісних характеристик від розміру й форми сформованих наночасток із метою визначення властивостей нанокомпозиційних матеріалів на їхній основі.

Важливими властивостями наночасток і наносистем є їхні механічні властивості: модулі пружності, твердість, міцність, зносостійкість, а також здатність до агломерації й взаємної адгезії.

ISSN 2311-1100 CC-BY-NC

Для з'ясування цих властивостей ми повинні вивчити реакцію наших об'єктів на різні деформації, напруги й взаємодії.

Найпростішою деформацією є однобічна деформація, якій в масивних тілах відповідає закон Гука.

В експерименті сила є величиною, що задається, тому пружні властивості визначаються через силу. У комп'ютерному моделюванні величиною, що задається, є деформація. Таким чином, ми можемо змінювати розміри досліджуваної частки й обчислювати зміни її повної енергії.

Без розуміння властивостей поверхні твердого тіла важко розуміти властивості наночасток. Однак найчастіше поверхня є тим будівельним майданчиком, на якому створюються й існують нанооб’єкти. У багатьох випадках ці об'єкти й існувати без стабілізуючої їхньої поверхні не можуть.

Нами проаналізовано знаходження нанозолота:

1. Металеві нанопокриття на поверхнях оксидів.

2. Моделювання малих нанорозмірних кластерів на поверхні кремнію.

3. Міграція атомів благородних металів у графіті.

Головним фактором, що виявляють - вплив на фізичні й хімічні властивості малих часток у міру зменшення їх розмірів, є зростання в них відносної частки "поверхневих" атомів, що знаходяться в інших умовах (координаційне число, симетрія локального оточення й т.п.), чим атоми об'ємної фази. Так як властивості поверхневих і внутрішніх оболонок НЧ різняться, це не дозволяє вважати їх однорідними. Глибина взаємодії таких часток з навколишнім середовищем визначається двома основними факторами: поверхневою енергією й природою хімічної речовини НЧ.

У нанорозмірному стані можна виділити наступні фізико-хімічні особливості поведінки речовин - збільшення хімічного потенціалу речовин на міжфазній границі високої кривизни.

- більша кривизна поверхні НЧ і зміна топології зв'язку атомів на поверхні приводить до зміни їх хімічних потенціалів. Внаслідок цього суттєво змінюється розчинність, реакційна й каталітична здатність НЧ і їх компонентів;

- більша питома поверхня наноматеріалів. Дуже висока питома поверхня (розраховуючи на одиницю маси) наноматеріалів збільшує їхню адсорбційну ємність, хімічну реакційну здатність і каталітичні властивості. Це може приводити, зокрема, до збільшення продукції вільних радикалів і активних форм кисню й далі до ушкодження біологічних структур (ліпіди, білки, нуклеїнові кислоти, зокрема, ДНК);

- невеликі розміри й різноманітність форм наночасток. НЧ внаслідок своїх невеликих розмірів можуть зв'язуватися з нуклеїновими кислотами (спричиняючи, зокрема, утворення аддуктів

ДНК), білками, вбудовуватися в мембрани, проникати в клітинні органелли й тим самим змінювати функції біоструктур;

- висока адсорбційна активність. Через свою високорозвинену поверхню наночастки мають властивості високоефективних адсорбентів, тобто здатні поглинати на одиницю своєї маси в багато разів більше речовин, що адсорбуються, чим макроскопічні дисперсії. Можлива також адсорбція на наночастках різних кінтаминантів і полегшення їх транспорту усередину клітини, що різко збільшує токсичність останніх. Багато наноматеріалів мають гідрофобні властивості або є електрично зарядженими, що підсилює як процеси адсорбції на них різних токсикантів, так і їх здатність проникати через бар'єри організму;

- висока здатність до акумуляції. Можливо, що через малий розмір наночастки можуть не розпізнаватися захисними системами організму, вони не зазнають біотрансформації й не виводяться з організму. Це веде до накопичення НЧ у рослинних й тваринних організмах, а також збільшує їх в організм людини.

- здібність до агрегації. Первинні частки можуть бути в різному ступені агрегованні й агломерованні, при цьому, чим менше середній розмір первинних часток, тим сильніше виражений ефект утворення агрегатів і агломератів. Відомі до теперішнього часу біологічні ефекти НЧ металів можна розділити на дві великі групи: (1) біоцидна дія (тобто здатність убивати живі організми), зареєстроване в основному в експериментах на мікроорганізмах, і (2) зміна функцій живих організмів, що проявляється на біологічних об'єктах різних рівнів організації, включаючи людину. Зміна функцій під дією НЧ може бути як позитивною, так і негативною. Інакше кажучи, НЧ металів можуть виявляти як лікувальний ефект, так і викликати появу різних патологій. На сьогоднішній день у світовій літературі вже накопичене багато інформації про те, що НЧ металів можуть викликати серйозну патологію в живих організмах - "нанопатологію". Показано, що токсичність наноматериалів залежить не тільки від фізичної природи, способу одержання, розмірів, структури НЧ металів, але й від біологічної моделі, на якій проводяться випробування.

Сукупність викладених факторів свідчить про те, що НЧ металів мають зовсім інші фізико-хімічні властивості, а отже іншою біологічною дією на живі організми. Тому оцінка потенційного ризику для здоров'я людини й стану середовища проживання у всіх випадках є обов'язковою.

Механізм розвитку токсичності пов'язаний з окиснювальним стресом, порушенням функцій мітохондрій і збільшенням проникності мембрани.

Токсичність НЧ металів прямо пов'язана з їхніми розмірами, а виходить, із украй високою питомою площею, яка спричиняє високу хімічну активність і високу здатність до проникнення в

організм, таким чином, чим менше розмір матеріалу, тим більше його питома площа й тим більше ступінь токсичності матеріалу.

Результати аналізу дозволили побудувати математичну модель токсичності нанозолота (1).

$$State = nrXY \begin{cases} 1, якщо & n \to a, \\ 0, n \to \infty \end{cases} \quad (1)$$

де State – оцінка стану організму; n – кількість наночасток; r – розмір наночастки золота, X – наночастки золота; Y – наночастки сполученого з наночастками золота матеріала; a – кількість наночасток, яка необхідна для «нормальної» життєдіяльності організму.

При аналізі було зроблено висновок, що одною с властивостей наночасток є їх форма, тим сильніше буде позитивний вплив, якщо частка буде мати сферичну форму. Нами було отримано за допомогою програми MathCad 15.0 сферичну модель наночастки.

Таблиця 1 представляє основні властивості моделі 1, що описують вірогідність даної моделі.

Таблиця 2

Властивості моделі

Значення параметру	Інформативність	Адекватність	Стійкість		Оцінюючі та властивості, що пророкують
			r між регресорами	r з відгуком	
Розрахункове	0,91	2,1	0,3	0,25	1,7
Табличне	-	1,4	-	-	1,4
Висновок	Інформативна	Адекватна	Стійка		Високі властивості

Отже, модель є стійкою, має властивості, що пророкують (стан організму), а також властивості, що описують (вид наночастки, розмір та їх кількість).

Conclusions. 1. Проведено аналіз класифікації й способів одержання наноматеріалів. Виявлено, що для діагностичних та терапевтичних цілей найчастіше та найефективніше застосовують наночастки золота. Розглянуті методи синтезу наночасток золота мають широке впровадження в експериментальній практиці.

2. Розглянуто властивості наноматеріалів, зокрема золотих наночасток. Побудовано моделі основних властивостей наночасток. Виявлені позитивні властивості наночасток золота, зокрема діагностичні та негативні, які приводять до, так званих, «нанопатологій». Серед властивостей наночасток золота виявлені токсична дія на біологічні об’єкти.

ISSN 2311-1100 CC-BY-NC

3. На основі проведених досліджень побудовано сферичні моделі наночасток золота, які згідно світовим даним мають більшу ефективність при лікуванні. Побудовано модель, що відбиває властивості наночасток золота при зміні їх характеристик. Дана модель має властивості, що пророкують (стан організму), а також властивості, що описують (вид наночастки, розмір та їх кількість). Модель може використовуватись при побудові біотехнічних систем діагностики та лікуванні біологічних об’єктів.

4. Проведено математичне моделювання, яке підтвердило можливість використання даних моделей для прогнозування динаміки захворювань.

Conflict of interest statement: The authors state that there are no conflicts of interest regarding the publication of this article.

ISSN 2311-1100 CC-BY-NC

REFERENCES:

1. Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2007. 134с

2. Дыкман Л.А., Богатырев В.А., Щеглов С.Ю., Хлебцов Н.Г. Золотые наночастицы: синтез, свойства, биомедицинское применение. М.: Наука, 2008. 319 с

3. Лапач С.Н., Чубенко А.В., Бабич П.Н. Статистические методы в медико–биологических исследованиях с использованием Excel, К: МОРИОН, 2000. 319 с.

100% Unique

Total 13878 chars (2000 limit exceeded) , 260 words, 16 unique sentence(s).

Essay Writing Service - ***Paper writing service you can trust. Your assignment is our priority! Papers ready in 3 hours! Proficient writing: top academic writers at your service 24/7! Receive a premium level paper!***

Results	Query	Domains (original links)
Unique	Робота присвячена аналізу й побудові моделей властивостей наночасток золота	-
Unique	У роботі проводиться аналіз класифікації наночасток, зокрема, золота, їх способів отримання та основних властивостей	-
Unique	На основі літературних даних проводиться аналіз ступеня токсичності та причин токсичності золотих наночасток	-
Unique	В результаті аналізів будуються моделі властивостей наночасток золота	-
Unique	Ключові слова: наночастки, золото, токсичність	-
Unique	The work is devoted the analysis and construction of models of gold nanoparticles' properties	-
Unique	As a result of analyses models of gold nanoparticles' properties are under construction	-
Unique	Most researchers prefer parenteral administrat	-
Unique	workDOI:LCC - № Q300-390Вивчення токсичності золотих наночастокАнастасія Новікова1, Валерій Карлюка11 Херсонський національний технічний університет, УкраїнаAddress	-
Unique	In work nanoparticles' classification analysis, in particular, gold, their ways of reception and the	-
Unique	On the basis of the literary data the analysis of degree of toxicity and the	-
Unique	In recent years, the researchers have focused on the practical implementation of nanosized materials in	-
Unique	A special place among such materials used for diagnostic and therapeutic purposes, occupy nanoparticles	-
Unique	To date, a significant number of works on their use in various fields of	-