



Получено: 28.04.2023 г. | Принято: 4.05.2023 г. | DOI: <https://doi.org/10.22184/1993-8578.2023.16.3-4.186.194>

Научная статья

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ БИОАКТИВНЫХ НАНОЧАСТИЦ СИЛИКАТА МАГНИЯ

Д.Г.Маглакелидзе¹, студент, лаборант, ORCID: 0000-0002-7740-042X / ogonioc2015@mail.ru

А.А.Блинова¹, к. т. н., доц., ORCID: 0000-0001-9321-550X

И.М.Шевченко¹, к. т. н., доц., ORCID: 0009-0005-9113-9335

М.А.Тараванов¹, студент, лаборант, ORCID: 0000-0003-3243-3241

М.А.Колодкин¹, зав. учебно-лабораторным комплексом, ORCID: 0009-0004-2045-4787

Я.А.Облогин¹, студент, ORCID: 0009-0003-5180-9045

Д.А.Жуковский¹, студент, ORCID: 0009-0004-6066-9299

Аннотация. В данной работе представлены результаты исследования биоактивных наночастиц силиката магния. Сами наночастицы получали методом химического осаждения в водной среде. Размер и форму образцов исследовали на ПЭМ-микроскопе. Установлено, что поверхность образцов представлена крупными агрегатами. В свою очередь, агрегаты состоят из сферических наночастиц силиката магния с размерами от 10 до 20 нм. На следующем этапе, с помощью нейросетевой обработки экспериментальных данных проводили оптимизацию синтеза наночастиц. Анализ полученной тернарной поверхности показал, что для получения образцов с наименьшим размером агрегатов (700 нм) параметрами синтеза являются: температура – 50 °С, скорость перемешивания – 600 об/мин, концентрация прекурсора – 0,5 моль/л. Определив оптимальные параметры синтеза силиката магния, проводили компьютерное квантово-химическое моделирование. В результате расчетов обнаружено, что энергия конфигурации составила $E = -709,302$ ккал/моль, величина химической жесткости $\eta = 0,191$ эВ, а мягкости – $S = 2,62$ эВ⁻¹. На основе полученных данных можно заключить, что $MgSiO_3$ обладает высокой стабильностью и характеризуется, как относительно мягкая молекула. На заключительном этапе работы образцы исследовали на ИК-спектрометре. Анализ ИК-спектра показал наличие характерных полос поглощения, которые соответствуют колебаниям связей в молекуле $MgSiO_3$.

Ключевые слова: биоактивные наночастицы, силикат магния, нейросетевая обработка экспериментальных данных

Для цитирования: Д.Г. Маглакелидзе, А.А. Блинова, И.М. Шевченко, М.А. Тараванов, М.А. Колодкин, Я.А. Облогин, Д.А. Жуковский. Синтез и изучение структуры биоактивных наночастиц силиката магния. НАНОИНДУСТРИЯ. 2023. Т. 16, № 3-4. С. 186-194. <https://doi.org/10.22184/1993-8578.2023.16.3-4.186.194>

Received: 28.04.2023 | Accepted: 4.05.2023 | DOI: <https://doi.org/10.22184/1993-8578.2023.16.3-4.186.194>

Original paper

SYNTHESIS AND STUDY OF THE STRUCTURE OF BIOACTIVE MAGNESIUM SILICATE NANOPARTICLES

D.G.Maglkelidze¹, Student, Laboratory assistant, ORCID: 0000-0002-7740-042X / ogonioc2015@mail.ru

A.A.Blinova¹, Cand. of Sci. (Tech), Associate Professor, ORCID: 0000-0001-9321-550X

I.M.Shevchenko¹, Cand. of Sci. (Tech), Associate Professor, ORCID: 0009-0005-9113-9335

M.A.Taravanov¹, Student, Laboratory assistant, ORCID: 0000-0003-3243-3241

¹ Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия / North Caucasus Federal University, Stavropol, Russia



M.A.Kolodkin¹, Head of Educational and Laboratory Complex, ORCID: 0009-0004-2045-4787

Y.A.Oblogin¹, Student, ORCID: 0009-0003-5180-9045

D.A.Zhukovsky¹, Student, ORCID: 0009-0004-6066-9299

Abstract. This paper presents the results of a study of bioactive magnesium silicate nanoparticles. The nanoparticles themselves were obtained by chemical precipitation in an aqueous medium. The size and shape of the samples were examined on a TEM microscope. It is established that objects of detection by aggregates are detected. In turn, the aggregates consist of spherical magnesium silicate nanoparticles with sizes from 10 to 20 nm. At the next stage, with the help of neural network processing of experimental data, the synthesis of nanoparticles was optimized. Analysis of the obtained ternary surface showed that to obtain samples with the smallest aggregate size (700 nm), the synthesis parameters are: temperature – 50 °C, stirring speed – 600 rpm, precursor concentration – 0.5 mol/l. Having determined the optimal parameters for the synthesis of magnesium silicate, computer quantum chemical modeling was carried out. As a result of calculations, it was found that the energy of the configuration was $E = -709.302$ kcal/mol, the value of chemical hardness $\eta = 0.191$ eV, and softness – $S = 2.62$ eV⁻¹. Based on the data obtained, it can be concluded that MgSiO₃ has a high stability and is characterized as a relatively soft molecule. At the final stage of the work, the samples were examined on an IR spectrometer. An analysis of the IR spectrum showed the presence of characteristic absorption bands, which correspond to bond vibrations in the MgSiO₃ molecule.

Keywords: bioactive nanoparticles, magnesium silicate, neural network processing of experimental data

For citation: D.G. Maglakelidze, A.A. Blinova, I.M. Shevchenko, M.A. Taravanov, M.A. Kolodkin, Y.A. Oblogin, D.A. Zhukovsky. Synthesis and study of the structure of bioactive magnesium silicate nanoparticles. NANOINDUSTRY. 2023. V. 16, no. 3-4. PP. 186–194. <https://doi.org/10.22184/1993-8578.2023.16.3-4.186.194>.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в медицине активно развивается область биосовместимых материалов, необходимых для ускорения регенерации костной ткани [1–4]. Одним из перспективных направлений данной отрасли является разработка различных костных цементов. Костные цементы – это материалы, которые используются для заполнения дефектов кости с целью восстановления ее целостности и функциональности. Они обладают рядом преимуществ, таких как высокая бактерицидность, возможность точной аппликации и формирования костной ткани, а также возможность сокращения времени заживления. Существует множество видов костных цементов, включая керамические, полимерные и гидрогелевые. Керамические костные цементы, такие как гидроксипатит и трикальцийфосфат с включениями наночастиц силикатов магния и цинка, обладают высокой биоактивностью и оптимальной степенью резорбции, что делает их особенно привлекательными для использования в медицинских целях [5–7]. Так, полимерные костные цементы – полиакрилонитрил и полиметилметакрилат, обладают повышенной прочностью и долговечностью, но имеют более высокую токсичность и риск вызова аллергических реакций [8].

INTRODUCTION

Recently, the field of biocompatible materials necessary to accelerate bone tissue regeneration has been actively developed in medicine [1–4]. One of the promising areas of this industry is the development of various bone cements. Bone cements are materials that are used to fill bone defects in order to restore bone integrity and functionality. They offer a number of advantages, such as high bactericidal resistance, possibility of precise application and bone formation, and possibility of shorter healing times. There are many types of bone cements, including ceramic, polymeric and hydrogel cements. Ceramic bone cements such as hydroxyapatite and tricalcium phosphate with inclusions of magnesium and zinc silicate nanoparticles are highly bioactive and have an optimal resorption rate, which makes them particularly attractive for medical use [5–7]. For example, polymeric bone cements, polyacrylonitrile and polymethyl methacrylate, have improved strength and durability, but have higher toxicity and risk of causing allergic reactions [8]. Despite some disadvantages and risks, bone cements will be an important tool in the treatment of bone defects for a long time [9].

There are also many promising studies on new materials development based on nanoscale forms of mineral components for bone osteogenesis [10–15]. These materials are more effective and safer due to their unique physicochemical and biomedical

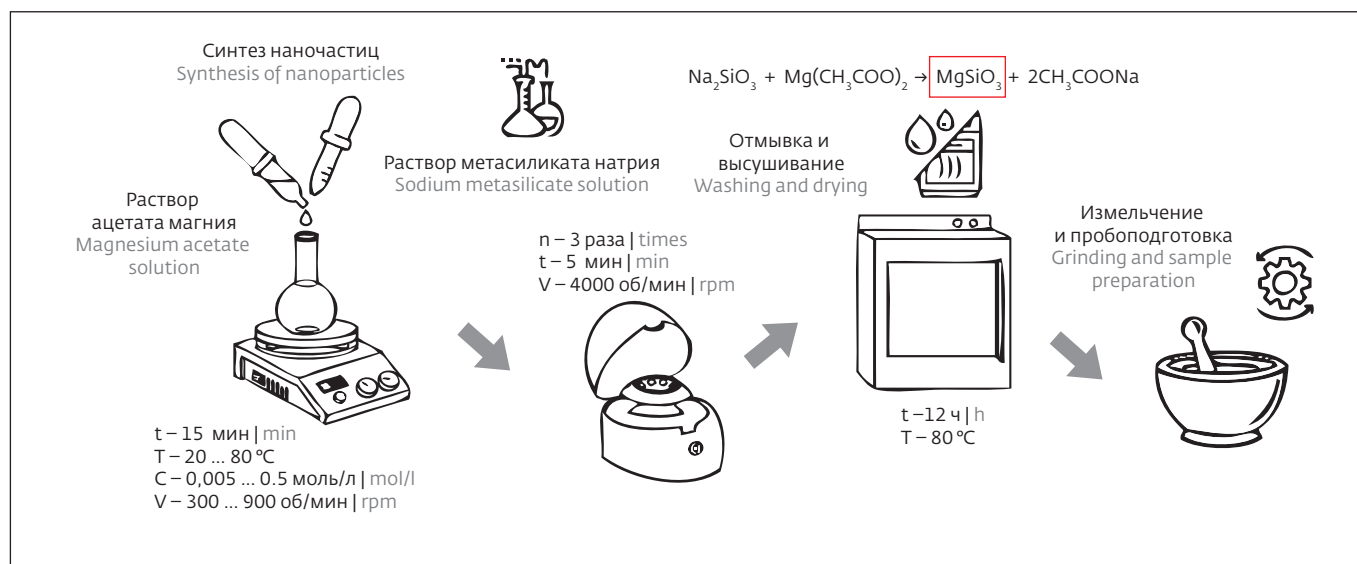


Рис.1. Схема синтеза наночастиц силиката магния
Fig.1. Scheme for the synthesis of magnesium silicate nanoparticles

Несмотря на некоторые недостатки и риски, костные цементы долгое время будут являться важным инструментом в лечении костных дефектов [9].

Также существует множество перспективных исследований по разработке новых материалов на основе наноразмерных форм минеральных компонентов для остеогенеза кости [10–15]. Данные материалы являются более эффективными и безопасными за счет уникальных физико-химических и медико-биологических свойств. Многими исследователями установлено влияние методов приготовления костных цементов с наночастицами с использованием ультразвука или введением аддитивов в процесс смешивания компонентов и формирования самих суспензий [16, 17].

В целом, костные цементы на основе фосфатно-силикатных наноконструируемых матриц кальция, цинка и магния представляют собой важный класс биоматериалов для лечения костных дефектов, которые имеют множество преимуществ и применяются в клинической практике уже много лет. На основе представленных данных об актуальном применении такого материала, как MgSiO_3 , в регенеративной медицине целью работы стали синтез и изучение структуры биоактивных наночастиц силиката магния.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Наночастицы силиката магния получали методом химического осаждения в водной

среде. Многочисленные исследования установили влияние методов приготовления костных цементов с наночастицами с использованием ультразвука или введения аддитивов в процесс смешивания компонентов и формирования самих суспензий [16, 17].

В целом, костные цементы на основе фосфатно-силикатных наноконструируемых матриц кальция, цинка и магния представляют собой важный класс биоматериалов для лечения костных дефектов, которые имеют множество преимуществ и применяются в клинической практике уже много лет. На основе представленных данных об актуальном применении такого материала, как MgSiO_3 , в регенеративной медицине целью работы стали синтез и изучение структуры биоактивных наночастиц силиката магния.

RESEARCH METHODS

Magnesium silicate nanoparticles were produced by chemical precipitation in aqueous medium at room temperature. The synthesis scheme is shown in Fig.1.

Magnesium acetate was used as magnesium precursor and sodium metasilicate as precipitant. In the first step sodium metasilicate and magnesium-containing precursor solutions were prepared with a concentration of 0.8 M. Then, a solution of the magnesium-containing precursor was added to the sodium metasilicate solution. The resulting sols were washed by centrifugation. Then, the washed sediments were dried in the desiccator at 80 °C.

Optimization of the synthesis technique for magnesium silicate nanoparticles was carried out using planning matrix and neural network selection of mathematical models. The multifactorial experiment allows us to consider influence of various factors



Таблица 1. Уровни варьирования основных переменных параметров

Table 1. Variation levels of the main variables

| Наименование параметров Parameters | Уровни варьирования переменных Variation levels of the main variables | | |
|----------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------|------|-----|
| V, Скорость перемешивания, об/мин Stirring speed, rpm | 300 | 600 | 900 |
| T, Температура, °C Temperature | 20 | 50 | 80 |
| C, Концентрация прекурсора, моль/л Precursor concentration, mol/l | 0,005 | 0,05 | 0,5 |

среде при комнатной температуре. Схема синтеза представлена на рис.1.

В качестве прекурсора магния использовали ацетат магния, а в качестве осадителя – метасиликат натрия. На первом этапе изготовили растворы метасиликата натрия и магнийсодержащего прекурсора с концентрацией 0,8 М. Далее, в раствор метасиликата натрия добавляли раствор магнийсодержащего прекурсора. Полученные золи отмывали методом центрифугирования. Далее, отмывые осадки высушивали в сушильном шкафу при температуре 80 °С.

Оптимизацию методики синтеза наночастиц силиката магния проводили с использованием матрицы планирования и нейросетевого подбора математических моделей. Многофакторный эксперимент позволяет рассмотреть влияние различных факторов (переменных параметров) на средний гидродинамический радиус получаемых образцов. В качестве входных параметров выбрали: температуру, скорость перемешивания и концентрацию прекурсора. Уровни варьирования представлены в табл.1. Осадитель брали в стехиометрических количествах.

Для изучения взаимного влияния всех факторов при минимальном количестве экспериментов сформировали матрицу планирования, состоящую из девяти экспериментов (табл.2).

С помощью математической обработки полученных экспериментальных данных в пакете прикладных программ Neural Statistica Network сформировали нейронную сеть с заданной математической моделью.

(variables) on the average hydrodynamic radius of the obtained samples. As input parameters we chose: temperature, stirring speed and precursor concentration. The levels of variation are shown in Table 1. The precipitant was taken in stoichiometric quantities.

In order to study mutual influence of all factors with a minimum number of experiments, a planning matrix of 9 experiments was generated (Table 2).

With the help of mathematical processing of the experimental data obtained in the Neural Statistica Network application package formed a neural network with a given mathematical model. Based on the generated mathematical model, a ternary surface describing mutual influence of the synthesis technological parameters on the average hydrodynamic radius of nanoparticles was obtained.

Average hydrodynamic radius of obtained magnesium silicate samples was studied by dynamic light scattering on Photocor-Complex spectrometer (Antek-97, Moscow, Russian Federation). Computer processing of the obtained experimental results was carried out using DynaLS computer software.

The shape and size of the particles were studied by transmission electron microscopy on a Tecnai G2 30F STWIN STEM instrument (FEI Company, Hillsborough, USA).

The functional groups in dried samples of magnesium silicate nanoparticles were studied by Fourier transform infrared spectroscopy on FSM-1201 infrared spectrometer (INFRASPEK, St. Petersburg, Russia).

Computer quantum chemical modeling of magnesium silicate nanoparticles was performed in QChem application package using IQmol molecular editor. Quantum-chemical parameters were calculated using the equipment of the data processing centre (Schneider Electric) of the North Caucasian Federal University.



Таблица 2. Матрица планирования эксперимента

Table 2. Experiment planning matrix

| № | Скорость перемешивания, об/мин Stirring speed, rpm | Температура, °C Temperature | Концентрация прекурсора, моль/л Precursor concentration, mol/l |
|---|-------------------------------------------------------|--------------------------------|-------------------------------------------------------------------|
| 1 | 300 | 20 | 0,005 |
| 2 | 300 | 50 | 0,05 |
| 3 | 300 | 80 | 0,5 |
| 4 | 600 | 20 | 0,05 |
| 5 | 600 | 50 | 0,5 |
| 6 | 600 | 80 | 0,005 |
| 7 | 900 | 20 | 0,5 |
| 8 | 900 | 50 | 0,005 |
| 9 | 900 | 80 | 0,05 |

На основе сформированной математической модели получили тернарную поверхность, описывающую взаимное влияние технологических параметров синтеза на средний гидродинамический радиус наночастиц.

Изучение среднего гидродинамического радиуса полученных образцов силиката магния проводили методом динамического рассеяния света на спектрометре Photocor-Complex (Антек-97, Москва, Российская Федерация). Компьютерную обработку результатов исследования осуществляли с использованием компьютерного программного обеспечения DynaLS.

Форму и размер частиц изучали методом просвечивающей электронной микроскопии на приборе Tecnai G2 30F STWIN STEM (FEI Company, Хиллсборо, США).

Исследование функциональных групп в высушенных образцах наночастиц силиката магния проводили методом инфракрасной спектроскопии на ИК-спектрометре ФСМ-1201 (ИНФРАСПЕК, Санкт-Петербург, Россия) с преобразованием Фурье.

Компьютерное квантово-химическое моделирование наночастиц силиката магния проводили в прикладном пакете программ QChem с использованием молекулярного редактора IQmol. Квантово-химические параметры рассчитывали на оборудовании центра обработки

данных. Математическая обработка экспериментальных данных была выполнена с использованием программ OriginPro 2021 и STATISTICA 12.

RESULTS

In the first stage, the magnesium silicate nanoparticle samples were examined by PEM microscopy. The results are shown in Fig.2.

Thus, during the examination of magnesium silicate nanoparticles PEM-micrographs were obtained in dark-field mode, characterizing the shape and size of the particles.

The synthesis of magnesium silicate nanoparticles was further optimised. By means of neural network processing and machine learning we obtained mathematical model describing mutual influence of synthesis process parameters on average radius of copper silicate nanoparticles. Based on the generated mathematical model, a ternary surface was formed, which is shown in Fig.3.

The analysis of the data obtained showed that two areas can be distinguished in the ternary surface: with the largest and smallest average particle radius.

In the next step, quantum-chemical computer simulation of magnesium silicate nanoparticles was carried out. The results are shown in Fig.4.

Thus, computer quantum-chemical simulations yielded a model of the molecular complex, electron density distribution, as well as models of the higher

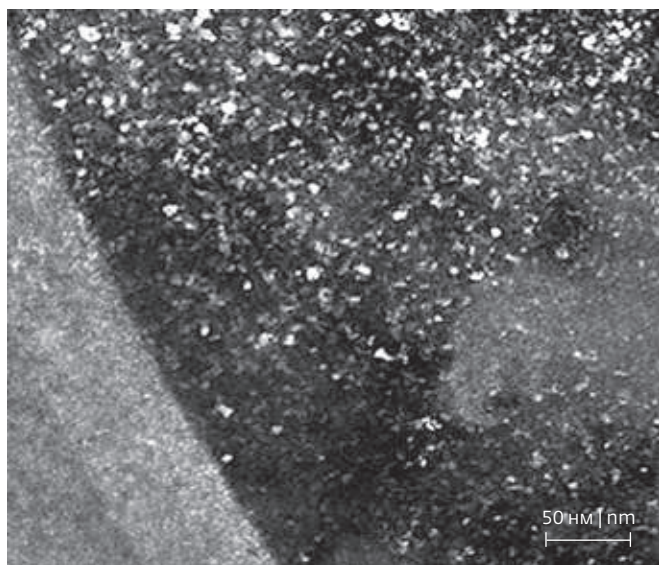


Рис.2. ПЭМ-микрофотография наночастиц $MgSiO_3$ в темнопольном режиме

Fig.2. TEM micrograph of $MgSiO_3$ nanoparticles in dark field mode

данных (Schneider Electric) ФГАОУ ВО "Северо-Кавказский федеральный университет".

Математическую обработку экспериментальных данных проводили с использованием прикладных пакетов программ OriginPro 2021 и STATISTICA 12.

РЕЗУЛЬТАТЫ

На первом этапе образцы наночастиц силиката магния исследовали методом ПЭМ-микроскопии. Результаты представлены на рис.2.

Таким образом, в ходе исследования наночастиц силиката магния получили ПЭМ-микрофотографии в темнопольном режиме, характеризующие форму и размер частиц.

Далее проводили оптимизацию синтеза наночастиц силиката магния. С помощью нейросетевой обработки и машинного обучения получили математическую модель, описывающую взаимное влияние технологических параметров синтеза на средний радиус наночастиц силиката магния. На основе сформированной математической модели образовали тернарную поверхность, которая представлена на рис.3.

Анализ полученных данных показал, что в тернарной поверхности можно выделить две области: с наибольшим и наименьшим средним радиусом частиц.

На следующем этапе проводили компьютерное квантово-химическое моделирование

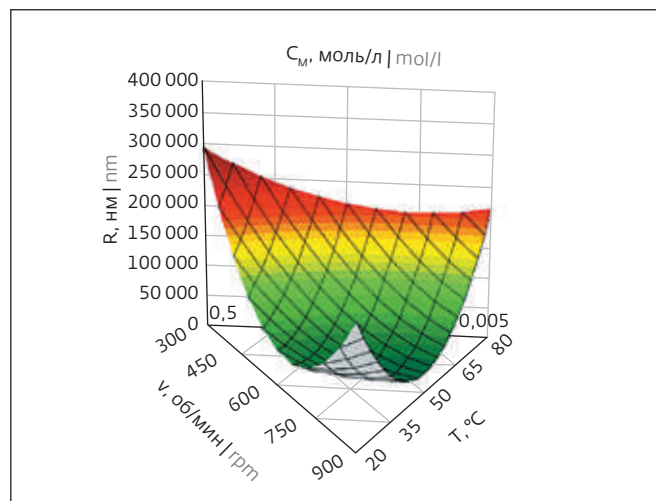


Рис.3. Тернарная поверхность, описывающая влияние концентрации прекурсора, температуры синтеза и скорости перемешивания на размер частиц силиката магния

Fig.3. Ternary surface describing the effect of precursor concentration, synthesis temperature, and rate of change on magnesium silicate particle size

populated molecular orbital and the lower free molecular orbital.

In the following step, the samples were examined by infrared spectroscopy. The IR spectrum of magnesium silicate nanoparticles is shown in Fig.5.

The analysis of the results showed that the IR spectrum of magnesium silicate nanoparticles shows bands characteristic of bond vibrations in the $MgSiO_3$ molecule.

DISCUSSION

The analysis of the PEM microscopy results showed that particle structure is represented by large aggregates with sizes ranging from 150 nm to 2 μm . In turn, these aggregates consist of magnesium silicate nanospheres with diameters ranging from 10 to 20 nm.

After studying dispersion characteristics of magnesium silicate nanoparticles we analyzed obtained ternary surface, which is shown in Fig.3. It was found that the smallest radius (700 nm) have samples that were obtained at the following parameters: synthesis temperature - 50 $^{\circ}C$, stirring speed - 600 rpm, the precursor concentration - 0.5 mol/l. In turn, the results of sample study by dynamic light scattering showed the average size of aggregates consisting of nanoparticles of spherical shape. This fact was confirmed by the transmission electron microscopy results.

Having determined the optimal synthesis parameters, computer quantum-chemical simulations of magnesium silicate particles themselves were performed. The calculations showed that configuration

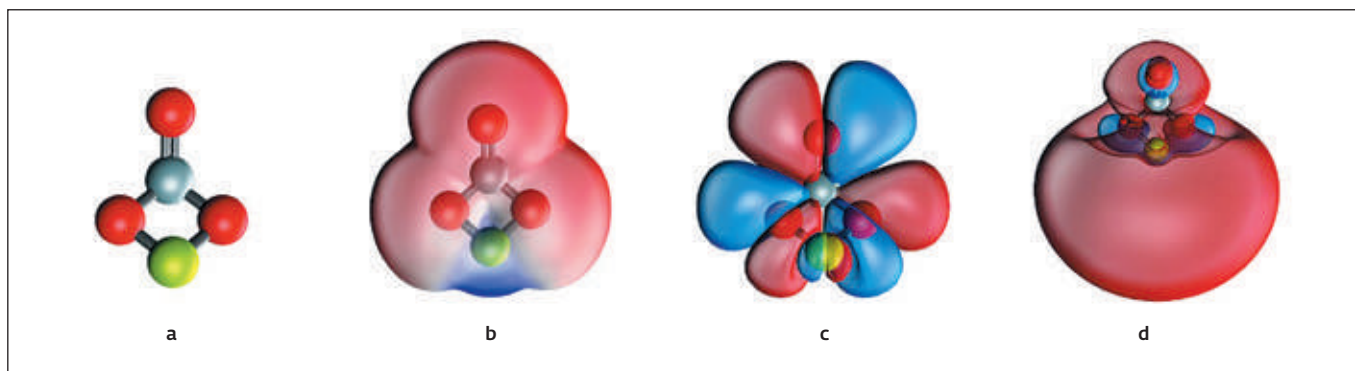


Рис.4. Результаты моделирования молекулы $MgSiO_3$: а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; с – высшая заселенная молекулярная орбиталь НОМО; д – низшая свободная молекулярная орбиталь LUMO
 Fig.4. Modeling results of the $MgSiO_3$ molecule: a – molecular complex model; b – electron density distribution; c – highest occupied molecular orbital НОМО; d – lowest unoccupied molecular orbital LUMO

наночастиц силиката магния. Результаты представлены на рис.4.

Таким образом, в результате компьютерного квантово-химического моделирования получили модель молекулярного комплекса, распределение электронной плотности, а также модели высшей заселенной молекулярной орбитали и низшей свободной молекулярной орбитали.

На следующем этапе образцы исследовали методом ИК-спектроскопии. ИК-спектр наночастиц силиката магния представлен на рис.5.

Анализ результатов показал, что в ИК-спектре наночастиц силиката магния наблюдаются полосы, характерные для колебаний связей в молекуле $MgSiO_3$.

ОБСУЖДЕНИЕ

Анализ результатов ПЭМ-микроскопии показал, что структура частиц представлена крупными агрегатами с размерами от 150 нм до 2 мкм. В свою очередь, эти скопления состоят из наносфер силиката магния, диаметр которых варьируется от 10 до 20 нм.

Изучив дисперсные характеристики наночастиц силиката магния, проанализировали полученную тернарную поверхность, которая представлена на рис.3. Установлено, что наименьшим радиусом (700 нм) обладают образцы, которые получены при следующих параметрах: температура синтеза – 50 °С, скорость перемешивания – 600 об/мин, концентрация прекурсора – 0,5 моль/л. В свою очередь, результаты исследования образцов методом динамического рассеяния света показали средний размер агрегатов, состоящих из наночастиц сферической формы. Данный факт подтверждается

energy was $E = -709.302$ kcal/mol, $E_{\text{HOMO}} = -0.396$ eV, $E_{\text{LUMO}} = -0.015$ eV. From these data we calculated chemical stiffness of the molecule which was equal to $\eta = 0.191$ eV. This fact indicates the stability of the molecular complex as $\eta > 0.1$ eV and the relative softness of the molecule as $S = 2.62$ eV⁻¹.

After studying the quantum-chemical values, the obtained samples were examined by infrared spectroscopy. IR spectrum analysis of magnesium silicate nanoparticles showed presence of intense bands of strain vibrations of the following bonds: at 500 to 1800 cm^{-1} ; the region at 532 to 677 cm^{-1} corresponds to metal-oxygen vibrations of the magnesium Mg–O bond, at 829 and 896 cm^{-1} to symmetrical vibrations of the O–Si–O bond, the region at 974 to 1118 cm^{-1} corresponds to vibrations of the Si–O bond, at 1327 and 1382 cm^{-1} to vibrations of the Si–O–Si bond, the band at 1510 and the region 1633–1672 cm^{-1} correspond to vibrations of the Si–O bond. Thus, it can be concluded that in infrared spectrum one observes characteristic absorption bands which correspond to bond vibrations in the $MgSiO_3$ molecule.

CONCLUSIONS

Thus, magnesium silicate nanoparticles were obtained in this work. The size and shape of the obtained particles were investigated by PEM microscopy. The analysis of obtained results showed that the samples surface is represented by large aggregates. In turn, the aggregates consist of spherical magnesium silicate nanoparticles with sizes ranging from 10 to 20 nm.

The next step was to optimise nanoparticle synthesis. Using neural network processing of experimental data and machine learning, a ternary surface describing mutual influence of the synthesis process parameters on the average particle radius was obtained. The size was determined by dynamic light scattering. It



результатами просвечивающей электронной микроскопии.

Определив оптимальные параметры синтеза, провели компьютерное квантово-химическое моделирование самих частиц силиката магния. В результате расчетов установлено, что энергия конфигурации составила $E = -709,302$ ккал/моль, $E_{\text{HOMO}} = -0,396$ эВ, $E_{\text{LUMO}} = -0,015$ эВ. На основе полученных данных рассчитали химическую жесткость молекулы, которая составила $\eta = 0,191$ эВ. Данный факт говорит о стабильности молекулярного комплекса, так как $\eta > 0,1$ эВ и относительной мягкости молекулы, так как $S = 2,62$ эВ⁻¹.

Изучив квантово-химические показатели, полученные образцы исследовали с помощью ИК-спектроскопии. Анализ ИК-спектра наночастиц силиката магния показал наличие интенсивных полос деформационных колебаний следующих связей: в области от 500 до 1800 см⁻¹; область от 532 до 677 см⁻¹ соответствует колебаниям металлкислородных связей магния Mg-O, на 829 и 896 см⁻¹ – симметричным колебаниям связи O-Si-O, область от 974 до 1118 см⁻¹ соответствует колебаниям связи Si-O, на 1327 и 1382 см⁻¹ – колебания связи Si-O-Si, полоса на 1510 и область 1633–1672 см⁻¹ соответствуют колебаниям связи Si-O. Таким образом, можно заключить, что в ИК-спектре наблюдаются характерные полосы поглощения, которые соответствуют колебаниям связей в молекуле MgSiO₃.

ВЫВОДЫ

Таким образом, в ходе работы получили наночастицы силиката магния. Размер и форму полученных частиц исследовали с помощью ПЭМ-микроскопии. Анализ полученных результатов показал, что поверхность образцов представлена крупными агрегатами. В свою очередь, агрегаты состоят из сферических наночастиц силиката магния с размерами от 10 до 20 нм.

На следующем этапе проводили оптимизацию синтеза наночастиц. С помощью нейросетевой обработки экспериментальных данных и машинного обучения получили тернарную поверхность, описывающую взаимное влияние технологических параметров синтеза на средний радиус частиц. Размер определяли методом динамического рассеяния света. Установлено, что оптимальными параметрами синтеза наночастиц силиката магния являются: температура синтеза – 50 °С, скорость перемешивания – 600 об/мин, концентрация прекурсора – 0,5 моль/л.

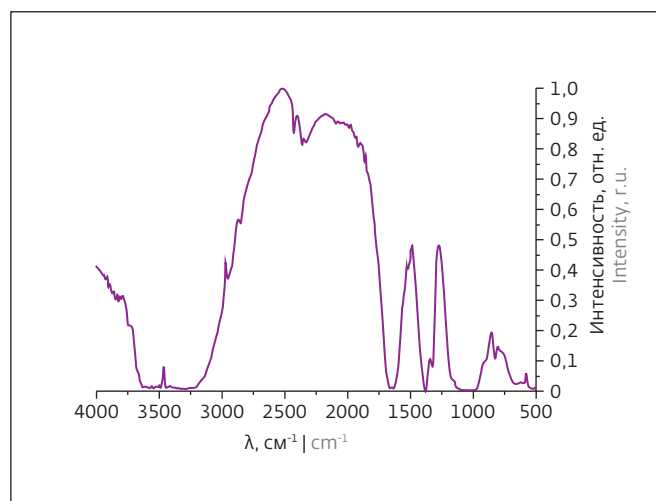


Рис.5. ИК-спектр наночастиц MgSiO₃
Fig.5. IR spectrum of MgSiO₃ nanoparticles

was found that the optimal synthesis parameters of magnesium silicate nanoparticles are: synthesis temperature – 50 °C, stirring speed – 600 rpm, and precursor concentration – 0.5 mol/l.

Further quantum-chemical computer simulations of magnesium silicate particles were performed. As a result of calculations, a model of molecular complex with electron density distribution, E_{HOMO} and E_{LUMO} was obtained. It was found that configuration energy was $E = -709.302$ kcal/mol, the chemical stiffness value $\eta = 0.191$ eV and softness value $S = 2.62$ eV⁻¹. Thus, it can be concluded that MgSiO₃ has high stability and is characterized as a relatively soft molecule.

In the final stage of the work, the nanoparticle samples were examined by infrared spectroscopy. The results showed that in the infrared spectrum of the particles characteristic absorption bands were observed, which correspond to bond vibrations in the MgSiO₃ molecule.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was carried out with the financial support of the Grants Council of the President of the Russian Federation (project SP-476.2022.4).

PEER REVIEW INFO

Editorial board thanks the anonymous reviewer(s) for their contribution to the peer review of this work. It is also grateful for their consent to publish papers on the journal's website and SEL eLibrary eLIBRARY.RU.

Declaration of Competing Interest. The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.



Далее провели компьютерное квантово-химическое моделирование частиц силиката магния. В результате расчетов получили модель молекулярного комплекса с распределением электронной плотности, $E_{\text{НОМО}}$ и $E_{\text{ЛУМО}}$. Установлено, что энергия конфигурации составила $E = -709,302$ ккал/моль, величина химической жесткости $\eta = 0,191$ эВ, а мягкости $-S = 2,62$ эВ⁻¹. Таким образом, можно заключить, что MgSiO_3 обладает высокой стабильностью и характеризуется, как относительно мягкая молекула.

На заключительном этапе работы образцы наночастиц исследовали с помощью инфракрасной спектроскопии. Результаты показали, что в ИК-спектре частиц наблюдаются характерные полосы поглощения, которые соответствуют колебаниям связей в молекуле MgSiO_3 .

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации (проект СП-476.2022.4).

ИНФОРМАЦИЯ О РЕЦЕНЗИРОВАНИИ

Редакция благодарит анонимного рецензента (рецензентов) за их вклад в рецензирование этой работы, а также за размещение статей на сайте журнала и передачу их в электронном виде в НЭБ eLIBRARY.RU.

Декларация о конфликте интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в данной статье.

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Synthesis and Characterization of Calcium Silicate Nanoparticles Stabilized with Amino Acids Ed. By A.A. Blinova // *Micromachines*. 2023. Vol. 14. No. 2.
2. Dental implant systems / Ed. By Oshida Y // *International journal of molecular sciences*. 2010. Vol. 11. No. 4. PP. 1580-1678.
3. Materials in Dental Implantology. Ed. By S.Sarda, M.Ginebra, D.Rodriguez, J.Casals; M.Navarro, C.Aparicio, J.Manero, F.Gil, J.Planell, M.Nilsson In *Dental Biomechanics*; CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 2003. PP. 69-89.
4. An Overview of Zirconia Dental Implants: Basic Properties and Clinical Application of Three Cases / Ed. By M.B.Güngör, C.Aydin, H.Yilmaz, E.B.Gül. *J. Oral Implantol*. 2014. PP. 485-494.
5. Calcium Silicate Layer on Titanium Fabricated by Electrospray Deposition / Ed. By C.Buga, M.Hunyadi, Z.Gácsi, C.Hegedús, J.Hakl, U.Schmidt, S.J.Ding, A.Csík. *Mater. Sci. Eng*. 2019. PP. 401-408.
6. Bioactive Coating as a Surface Modification Technique for Biocompatible Metallic Implants / Ed. by B.Priyadarshini M.Rama, U.Chetan, A.Vijayalakshmi. *Review. J. Asian Ceram. Soc*. 2019, 7. PP. 397-406.
7. Some Biocompatible Materials Used in Medical Practice / Ed.by D.Mihov, B.Katerska, J.Trakia. *Sci*. 2010, 8, PP. 119-125.
8. Calcium orthophosphate bioceramics / Ed.by S.V.Dorozhkin // *Journal of Biomimetics, Biomaterials and Tissue Engineering*. - Trans Tech Publications Ltd, 2010. Vol. 5. PP. 57-100.
9. Fundamentals of the creation of medical polymers / Ed.by V.V.Zuev, 2022.
10. Porosity of 3D biomaterial scaffolds and osteogenesis / Ed.by D.Kaplan, V.Karageorgiou // *Biomaterials*. 2005. V. 26. No. 27. PP. 5474-5491.
11. Novel hydroxyapatite/chitosan bilayered scaffold for osteochondral tissue-engineering applications / Ed by J.M.Oliveira / *Scaffold design and its performance when seeded with goat bone marrow stromal cells* // *Biomaterials*. 2006. Vol. 27. No. 36. PP. 6123-6137.
12. Calcium orthophosphates in medicine: from ceramics to calcium phosphate cements Ed.by M.Bohner // *Injury*. 2000. Vol. 31. PP. 37-47.
13. Processing and properties of hydroxyapatite-based biomaterials for use as hard tissue replacement implants / Ed by W.Suchanek M. Yoshimura // *Journal of materials research*. 1998. Vol. 13. No. 1. PP. 94-117.
14. Bone regeneration in critical bone defects using three dimensionally printed β tricalcium phosphate/hydroxyapatite scaffolds is enhanced by coating scaffolds with either dipyrindamole or BMP-2 / Ed by S.Ishack // *Journal of biomedical materials research. Part B: Applied biomaterials*. 2017. Vol. 105. No. 2. PP. 366-375.
15. In vitro cytotoxicity of calcium phosphate cement reinforced with multiwalled carbon nanotubes Ed by L.Medvecký // *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*. 2019. Vol. 30. PP. 1-11.
16. Obtaining and properties of a composite material based on hydroxyapatite and a copolymer of lactide and glycolide: final bachelor's thesis in the direction of preparation / Ed.by Kobzev M.G.: 04.03. 01-Chemistry, 2018.
17. Application of scaffolds for bone regeneration strategies: current trends and future directions Ed by G. H. Billström // *Injury*. 2013. Vol. 44. PP. 28-33.

3-6 ОКТЯБРЯ 2023



XII ПЕТЕРБУРГСКИЙ МЕЖДУНАРОДНЫЙ ГАЗОВЫЙ ФОРУМ

ГЕНЕРАЛЬНЫЙ ПАРТНЕР



ГЕНЕРАЛЬНЫЙ СПОНСОР



ПАРТНЕРЫ



КОНГРЕССНО-ВЫСТАВОЧНЫЙ ЦЕНТР
ЭКСПОФОРУМ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГ, ПЕТЕРБУРГСКОЕ ШОССЕ, 64/1
+7 (812) 240 40 40 (ДОБ. 2626), GF@EXPOFORUM.RU

18+



@GASFORUMSPB

ПОДПИСЫВАЙТЕСЬ
НА НАШ TELEGRAM-КАНАЛ
И ЧИТАЙТЕ НОВОСТИ
РАНЬШЕ ВСЕХ!

GAS-FORUM.RU