

عنوان مقاله:

مطالعه شبیه سازی جذب داروی مترونیدازول در MOF-5

محل انتشار:

پنجمین همایش ملی توسعه علوم فناوریهای نوین در گیاهان دارویی، شیمی و زیست شناسی ایران (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 20

نویسنده:

اکرم قره بهادری - کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، دانشگاه نیشابور

خلاصه مقاله:

زمینه و هدف: چارچوب های فلز-آلی (metal-organic frameworks)، نسل جدیدی از پلیمرهای کئوردیناسیونی نانومتخلخل هستند که از اتصال دهنده آلی و خوشه های فلزی ساخته شده اند. چارچوب فلز-آلی به دلیل داشتن ویژگی های هر دو گروه، به عنوان مواد مناسبی در دارورسانی محسوب میشوند. بر همین اساس در تحقیق حاضر MOF-5 به عنوان حامل داروی مترونیدازول مورد بررسی قرار گرفت. مواد و روشها: در تحقیق حاضر برای بررسی میزان جذب داروی مترونیدازول بر روی ساختار MOF-5 در شرایط داخل بدن، از شبیه سازی مولکولی استفاده گردید. برای این منظور ساختار دارو و MOF-5 با نرم افزار GaussView، رسم و بهینه شد. سپس با استفاده از نرم افزار Materials studies شبیه سازی جذب در دماها و فشارهای مختلف انجام شده و نتایج حاصل با هم مقایسه گردید. نتایج: نتایج حاصل از شبیه سازی کامپیوتری نشان داد که مترونیدازول جذب مناسبی بر روی MOF-5 دارد. به نظر می رسد که بهترین جذب در فشارهای 15 تا 17 کیلوپاسکال و در دماهای 36/5 و 37/5 درجه ی سانتیگراد به دست می آید. از طرفی بررسی جذب مترونیدازول بر روی سایر چارچوب های فلز آلی نشان داد که MOF-17Y بیشترین میزان جذب دارو را دارد. نتیجه گیری: نتایج حاصل از تحقیق حاضر نشان دهنده ی پتانسیل MOF-5 به عنوان حامل داروی مترونیدازول می باشد با این حال این مشاهدات نیازمند انجام آزمایشات عملی در آزمایشگاه برای بررسی سایر جنبه های استفاده از MOF-5 به عنوان حامل مترونیدازول است.

کلمات کلیدی:

چارچوب فلز آلی، MOF-5، مترونیدازول، حامل دارو

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1560354>

