

عنوان مقاله:

بررسی برهم کنش داروی ضد سرطان ۵-فلوئوراسیل متصل شده به نانو خوشه بور فسفید (B₁₂P₁₂) خالص و جایگزین شده با تیتانیوم با نوکلئو باز آدنین: به روش نظریه تابعی چگالی

محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 22، شماره 2 (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 20

نویسندگان:

مهدی رضایی صامتی - گروه شیمی کاربردی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر

عاطفه رضایی - گروه شیمی کاربردی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر

خلاصه مقاله:

هدف از پژوهش حاضر بررسی جذب داروی ۵-فلوئوراسیل متصل شده به نانو خوشه (B₁₂P₁₂) خالص و جایگزین شده با تیتانیوم بر روی نوکلئو باز آدنین با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) است. در این کار ابتدا مدل‌های مختلفی برای جذب دارو بر روی نانو خوشه و آدنین در نظر گرفته شدند و سپس ساختار تمام مدل‌ها مورد نظر با استفاده از روش WB97XD/Lanl2DZ توسط نرم افزار گوسین (۰۹) بهینه سازی شدند. با استفاده از ساختارهای بهینه شده، پارامترهای ساختار فضایی مانند طول و زاویه پیوند، پارامترهای ترمودینامیکی، پارامترهای نظریه اتم در مولکول (AIM)، گرادیان کاهش چگالی (RDG)، طیف مرئی-فرابنفس (UV-visible)، اوربیتال های هومو و لومو (HOMO-LUMO)، نمودار های چگالی حالتها (DOS) محاسبه و نتایج آن ها مورد تجزیه تحلیل قرار گرفته اند. نتایج محاسبات نشان دادند که با جایگزینی اتم تیتانیوم در ساختار نانو خوشه B₁₂P₁₂ گاف انرژی و سختی شیمیایی کاهش قابل توجهی می یابند و این عامل سبب افزایش رسانایی سامانه می شود. از این خاصیت می توان برای ساخت نانو حسگرهای دارویی استفاده کرد. مقدار انرژی جذب و آنتالپی در کلیه مدل های مورد نظر منفی بوده که نشان دهنده مساعد بودن فرایند جذب و پایداری آنها از نظر ترمودینامیکی است. نتایج RDG و AIM تایید کردند که جذب داروی ۵-فلوئوراسیل متصل به سطح نانو خوشه با آدنین از نوع غیر کووالانسی است. بررسی نتایج حاصل از این مطالعه ثابت کرد که نانو خوشه بور فسفید خالص و جایگزین شده با اتم تیتانیوم، می تواند گزینه مناسبی برای استفاده از این ترکیب به عنوان جاذب و یا حسگر داروی ۵-فلوئوراسیل در فرایندهای زیستی باشد.

کلمات کلیدی:

۵-فلوئوراسیل، نانو خوشه بور فسفید، آدنین، نظریه تابعی چگالی، تیتانیوم، پارامتر های کوانتومی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1633976>

