



مطالعه داکینگ مولکولی و مکانیک کوانتومی برهمکنش کوئرتستین بر سطح فولرن $B_{12}N_{12}$

خدیجه توکلی هفشجانی^۱، طاهر شاهی^۲، محمد تقی بایی^۳

^۱ گروه شیمی، دانشکده علوم، واحد شهرکرد، دانشگاه آزاد اسلامی، شهرکرد، ایران

^۲ گروه ماشین آلات کشاورزی، واحد آزادشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، آزادشهر، گلستان، ایران

^۳ گروه شیمی، واحد آزادشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، آزادشهر، گلستان، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۴۰۱/۰۹/۱۰، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۴۰۱/۱۱/۱۸، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۴۰۱/۱۲/۱۶

چکیده

جذب و فعالیت آنتی رادیکالی مولکول کوئرتستین روی سطح فولرن $B_{12}N_{12}$ با کمک نظریه تابعیت چگالی (DFT) در روشهای B3PW91-D و M06-2X-D بررسی شده است. مقادیر جذب و تجزیه و تحلیل توپولوژی ها نشان داد که این مولکول به سطح فولرن $B_{12}N_{12}$ جذب شده است و تغییرات قابل توجهی در خواص الکترونیکی فولرن ایجاد می کند. فعالیت های آنتی اکسیدانی مولکول کوئرتستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ با استفاده از سطح تئوری M06-2X-D بر اساس انتقال اتم هیدروژن (HAT)، انتقال الکترون منفرد و پس از آن انتقال پروتون (SET-PT) و روش SPLET بررسی شده است. برای درک بهتر خواص آنتی اکسیدانی، مقادیر آنتالپی تفکیک پیوند (BDE)، پتانسیل یونیزاسیون (IP)، آنتالپی تفکیک پروتون (PDE)، پروتون خواهی (PA) و آنتالپی انتقال الکترون (ETE) کوئرتستین روی سطح فولرن $B_{12}N_{12}$ در گاز، بنزن، اتانول و آب محاسبه شده است. نتایج نشان داد که در گاز و فازهای حلال، جذب کوئرتستین روی $B_{12}N_{12}$ فولرن باعث افزایش فعالیت آنتی اکسیدانی کوئرتستین شده است، انرژی برهمکنش و ثابت مهارکنندگی در روش داکینگ مولکولی نیز این نتایج را تایید می کنند.

واژه های کلیدی: کوئرتستین، فعالیت ضد رادیکالی، مکانیسم های آنتی اکسیدان، فولرن ها، نظریه تابعیت چگالی (DFT)، داکینگ مولکولی

۱. مقدمه

فلاونوئیدها متابولیت های تخصصی گیاهی هستند که شامل گروه های بزرگی از ترکیبات پلی فنولی با وزن مولکولی کم است که این ترکیبات به انواع متعددی همچون، فلان آونن، آنتوسیانیدین، فلاونوئیل، فلوئون ها، کاتچینها (یا فلاوانولها)، ایزو فلوئونها، دی هیدروفلاونولها و کلوکانها تقسیم بندی می شوند [۱]. کوئرتسین، یک رنگدانه است که متعلق به یک گروه از ترکیبات گیاهی به نام

*عهده دار مکاتبات: محمدتقی بایی

نشانی: گروه شیمی، واحد آزادشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، آزادشهر، گلستان، ایران

پست الکترونیک: E-mail: Baei52@yahoo.com

تلفن: ۰۹۱۱۱۷۵۱۳۹۹

فلاونوئیدها است. فلاونوئیدها در سبزیجات، میوه ها، غلات و چای حضور دارند. آنها با چندین مزایای سلامتی از جمله کاهش خطر ابتلا به بیماری های قلبی، سرطان و اختلالات مغزی دژنراتیو مرتبط هستند. اثرات مفید فلاونوئیدها مانند کوئرستین از توانایی آنها در عملکرد آنتی اکسیدان ها در بدن انسان می باشد. آنتی اکسیدان ها ترکیباتی هستند که مانع فعالیت رادیکال های آزاد شده و از اکسیداسیون آنها جلوگیری می کنند و با غیر فعال کردن آنها سلول های بدن را از اثرات مخرب این ترکیبات مصون نگاه می - دارد [۲]. علاوه بر خاصیت آنتی اکسیدانی کوئرستین کشف شده، خاصیت تقویت دستگاه ایمنی بدن نیز برای آن مشخصا در شرایط تحت فشار و هنگام مصرف ویتامین C نیز کشف شده است. کوئرستین خاصیت ضد ویروسی دارد و در پوست سیب قرمز، انگور، بروکلی، پیاز قرمز، زغال اخته، مرکبات، گیلاس، گلابی، چای سبز، چای تیره، لوبیاجات، کلم کاهو و اسفناج یافت می - شود [۳]. هدف بررسی توانایی نانو قفسه های مختلف (فولرن ها) به عنوان یک جاذب و تاثیر آن روی ساختار فلاونوئیدها و متعاقب آن بر روی خاصیت آنتی اکسیدانی آنها و استفاده آن در سیستم بسته بندی مواد غذایی به منظور جذب رادیکالها با استفاده از نظریه DFT می باشد.

۲. روش های محاسباتی

در این تحقیق از روش های کامپیوتری مانند مکانیک کوانتومی و داکینگ مولکولی جهت بررسی برهمکنش مولکول کوئرستین با سطح فولرن بور-نیتريد استفاده شده است.

۲-۱. روش مکانیک کوانتومی

ساختارهای فولرن $B_{12}N_{12}$ و کوئرستین (شکل ۱) را با کمک نرم افزار Gauss View ترسیم و سپس با نرم افزار Gaussian ۰۹ [۴] و با کمک روشهای B3PW91-D و M06-2X-D3 بهینه شدند. براساس نتایج بدست آمده، انرژی شکاف فولرن $B_{12}N_{12}$ و کوئرستین حدود ۷/۰۱ و ۴/۴۷ الکترون ولت توسط تابع *B3PW91/6-31G و حدود ۹/۵۵ و ۶/۷۴ الکترون ولت توسط تابع M06-2X-D3 بدست آمده است. در کارهای قبلی مقادیر انرژی شکاف فولرن با استفاده از روش M05/LANL2DZ معادل ۷/۲۹ الکترون ولت محاسبه شده است [۵]. بنابراین با توجه به نتایج بالا روش *B3PW91/6-31G برای بررسی ساختار الکترونی و جذب quercetin روش مناسب تری می باشد.

۲-۲. روش داکینگ مولکولی

برای پیش بینی انرژی اتصال فولرن بور-نیتريد با مولکول کوئرستین از روش داکینگ و برنامه ی اتوداک ۴ استفاده شد که این برنامه برای پیش بینی چگونگی قرارگیری مولکول های کوچک نظیر دارو در اتصال با گیرنده (ممکن است پروتئینی باشد) طراحی شده است. همچنین برای جستجوی کانفورماسیون لیگاند الگوریتم ژنتیکی (LGA) انتخاب شد و اتم های هیدروژن ناقطبی با هم ادغام شدند و بار اتم های جزئی با استفاده از Gasteiger-Marsili تعیین شدند. جعبه شبکه مختلف با نقاط شبکه ای مختلف با فاصله

شبکه نقطه $1 A^\circ$ برای داکینگ در نظر گرفته شد و تعداد درجات آزادی زوایای پیچشی^۱ لیگاند با استفاده از نرم افزار ADT محاسبه شد. در نهایت فایل لیگاند به صورت pdbqt ذخیره گردید. پس از آماده سازی فایل‌های ورودی مورد نیاز داکینگ (ماکرومولکول، لیگاند و نقشه اتصال)، مطالعه داکینگ به منظور مدلسازی برهمکنش‌های لیگاند-رسپتور، با استفاده از الگوریتمی تحت عنوان ژنتیک لامارکی^۲ انجام شد [۶-۱۰]. در مطالعه حاضر، براساس حجم مولکولی لیگاندهای طراحی شده، شبکه ای با ابعاد $40 \times 40 \times 40$ آنگستروم برای فولرن $B_{12}N_{12}$ در راستای محورهای سه گانه مختصات و فاصله نقاط شبکه 0.326 آنگستروم (یک چهارم طول پیوند ساده کربن-کربن) که در برگزیده جایگاه فعال فولرن و لیگاند بود، در نظر گرفته شد. محاسبه Autogrid با پارامترهای تخصیص یافته منجر به تولید فایل نقشه اتم‌های مختلف می‌شود. به منظور اجتناب از تکرار در محاسبه Autogrid برای هر یک از لیگاندهای بانک ساختاری، نقشه تمام اتم‌هایی که توسط نرم افزار AutoDock پوشش داده می‌شود محاسبه و از این فایل‌ها در تمام محاسبات استفاده شد. در مرحله بعد باید فایل‌های اجرایی برنامه تعریف شده و همچنین پارامترهای مختلف داکینگ نیز تنظیم گردد. این اطلاعات به صورت فایل خروجی پارامتر داکینگ (dpf) و توسط نرم افزار ADT ذخیره می‌گردند. از آنجا که ترکیبات مورد مطالعه حاوی اتم بور هستند لازم است که در خروجی‌های داکینگ (dpf, gpf) پارامترهای اتم بور در فایل مذکور کپی شود [۸]. رتبه بندی تنها برای داده‌های انرژی آزاد اتصال لیگاند-رسپتور از فایل خروجی نهایی داکینگ (dlg) انجام گرفته است.

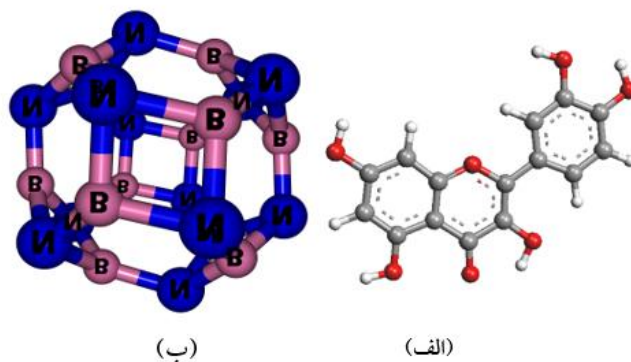
۳. نتایج و بحث

کوئرستین، یک فلاونوئید رنگدانه گیاهی است که معمولاً در میوه‌ها و سبزیجات، به ویژه پیاز، مرکبات و سیب یافت می‌شود [۱۱]. منابع دیگر عبارتند از توت سیاه، انگور و روغن زیتون. چای سبز نیز حاوی مقادیر قابل توجهی از کوئرستین هستند. فایده اولیه کوئرستین این است که دارای آنتی‌اکسیدان‌های قوی می‌باشد. آنتی‌اکسیدان‌ها در مقابل رادیکال‌های آزاد مبارزه می‌کنند. ترکیبات واکنش پذیر شیمیایی که به غشای سلولی و DNA آسیب زده و همچنین منجر به مرگ سلول می‌شوند. مطالعات نشان داده اند که مصرف فلاونوئیدها، به طور خاص کوئرستین، فایده دو برابری (حداقل) در ارتقاء سلامت کلی قلبی عروقی دارد. اول، جریان خون را تحریک می‌کند. دوم، محققان مشاهده کرده اند که فعالیت آنتی‌اکسیدانی کوئرستین در برابر اکسیداسیون کلسترول LDL محافظت می‌کند. این امر ممکن است مفید باشد، زیرا اکسیداسیون سبب می‌شود کلسترول LDL به دیواره شریان‌ها بچسبد. این ماده در بسیاری از منابع غذایی مختلف به صورت قابل توجهی یافت می‌شود، از جمله عسل، خربزه، کرفس، آلو، خرما، کلم بروکلی، سیب، سیب‌زمینی شیرین، زغال‌اخته، کلم بروکلی و بسیاری از غذاهایی که معمولاً مصرف می‌شوند. از آنجایی که تحقیقات مولکولی در مورد مواد ارگانیک مواد غذایی نسبتاً جدید است، تحقیقات بر روی آن همچنان ادامه دارد، اما مطالعات

¹ Torsional degree of freedom

² Lamarckian Genetic Algorithm(LGA)

زیادی در این زمینه صورت گرفته است که نشان می‌دهد که این فلاونوئید آنتی‌اکسیدان باعث افزایش قابل توجهی در میزان سطح سلامتی انسان می‌شود. بنابراین این ماده فوق‌العاده یکی از وظایف مهم محققین می‌باشد. ساختار این ترکیب در شکل زیر نشان داده شده است [۱۲].



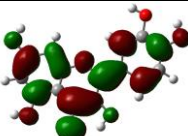

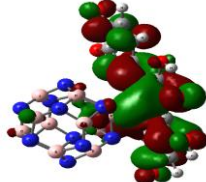
شکل ۱. ساختار کوئرتستین (الف)، فولرن $B_{12}N_{12}$ (ب)

در دهه های اخیر، تحقیقات زیادی بر روی فولرن و هترو فولرنها انجام شده است [۱۳-۱۵]. بنابراین در این تحقیق فولرن $B_{12}N_{12}$ انتخاب و کوئرتستین با جهت گیریهای مختلف به سطح فولرن نزدیک و محاسبات بر روی این فولرن انجام خواهد شد. ابتدا ساختار آن فلورن را با استفاده از روش DFT بهینه کرده تا طول و زوایای آن به مقدار واقعی نزدیک شده و انرژی آن ساختار محاسبه می‌گردد. در این مطالعه جهت گیری های مناسب برای برقراری اتصال بین کوئرتستین و سطح فولرن وجود دارد، با قراردادن کوئرتستین در هر موقعیت و بهینه کردن آن ساختار، مقدار انرژی جذب محاسبه می‌گردد. همچنین امکان انتقال بار الکتریکی بین ماده جذب شونده و سطح جاذب بررسی خواهد شد [۱۶].

۱-۳. جذب کوئرتستین روی فولرن $B_{12}N_{12}$

در مرحله بعد، مولکول کوئرتستین را روی سطح آن فولرن نزدیک کرده و انرژی جذبی آنها محاسبه می‌گردد. آنالیز اوربیتال پیوندی طبیعی (NBO) نشان می‌دهد که مقدار بارهای نقطه ای برای اتم های بورن (B) و نیتروژن (N) در $B_{12}N_{12}$ به ترتیب e $(+1/157)$ ، $(-1/157)$ توسط تابع $B3PW91/6-31G^*$ محاسبه شده است. مقادیر بارهای مثبت و منفی روی اتم های B و N فولرن ها نشان دهنده آن است که پیوندهای B-N آن یونی می‌باشند. همچنین علاوه بر یونی بودن پیوند B-N، مقادیر دانسیته الکترونی در شکل ۲-۳ نشان می‌دهد که اتمهای اکسیژن کوئرتستین و اتمهای B مولکول $B_{12}N_{12}$ می‌توانند انتراکشن مناسبی با همدیگر داشته باشند [۱۷]. بنابراین کوئرتستین از طریق اتم اکسیژن خود می‌تواند در جهت های مختلف به اتم بورن $B_{12}N_{12}$ نزدیک شود. با قراردادن مولکول کوئرتستین در هر موقعیت و بهینه کردن آن ساختارها میزان جذب آن مورد بررسی قرار می‌گیرد. یعنی پایدارترین آرایش فضایی نسبی بین مولکول کوئرتستین و سطح فولرن مورد نظر می‌باشد، همچنین امکان انتقال بار الکتریکی بین ماده جذب

شونده و سطح جاذب برای بررسی خصلت جذب آن بررسی خواهد شد. پس از بهینه کردن کامل آن ساختارها، پارامترهای طول پیوند، انرژیهای جذب، HOMO، LUMO، و Gap آن ساختارها محاسبه شده و سپس با مقایسه این نتایج در هر موقعیت تغییر خصوصیات آن مورد بررسی قرار می گیرد (شکل ۲).

نوع مولکول	HOMO&LUMO
کوئرتستین	
فولرن	
فولرن-کوئرتستین	

شکل ۲. هومو-لومو مولکولهای کوئرتستین، فولرن و کوئرتستین-فولرن

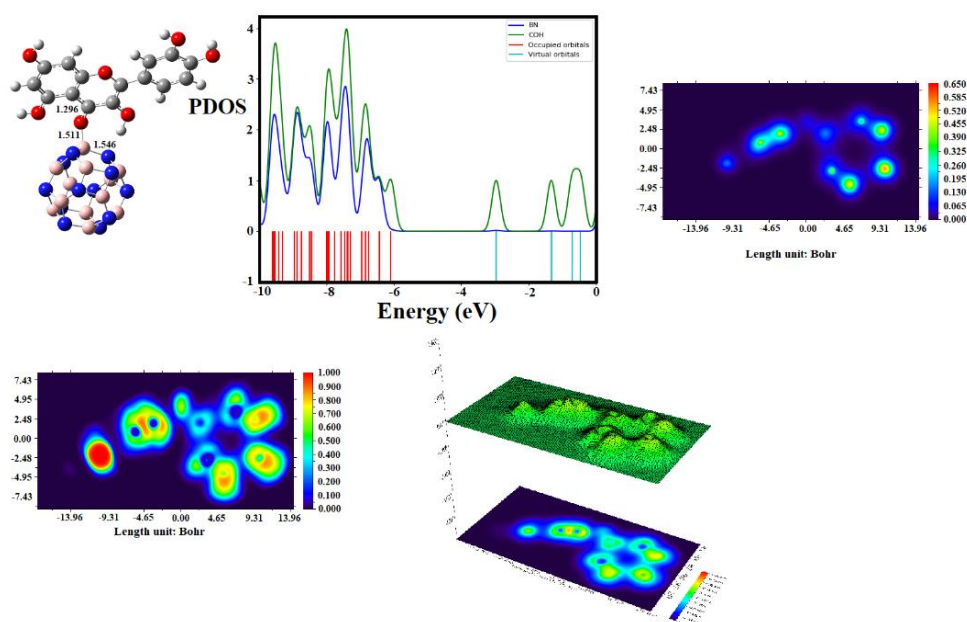
برای بدست آوردن انرژی جذبی از روش زیر استفاده می گردد:

$$(1) \quad E_b = E_{\text{Que-fullerene}} - (E_{\text{Que}} + E_{\text{fullerene}}) + E_{\text{BSSE}}$$

در این روش خطای توابع پایه نیز در نظر گرفته می شود. پس از نزدیکی کوئرتستین از طریق اتم اکسیژن خود با اتم بورن $B_{12}N_{12}$ و بهینه کردن آن ساختارها، نتایج بدست آمده نشان می دهد که یک ساختار جذب کوئرتستین روی آن فولرن پایدار بوده و مابقی فرمها به این حالت نوآرایی کرده است که در شکل (۳) نشان داده شده است. بنابراین جذب کوئرتستین این ساختار مورد بررسی قرار گرفت. پارامترهای طول پیوند، انرژیهای جذب، HOMO، LUMO، و Gap آن ساختار نسبت به فولرن خالص مقایسه و تغییر خصوصیات آن مورد بررسی قرار گرفت [۱۸].

مقدار انرژی جذب کمپلکس $B_{12}N_{12}/\text{Qure}$ با استفاده از روشهای B3PW91-D و M06-2X-D3، 256.55 و -256.19 کیلوکالری بر مول می باشد. (علامت منفی نشان دهنده گرمازا بودن فرایند و افزایش پایداری ساختارها است). این اعداد نشان میدهند که مقدار انرژی جذب کمپلکس $B_{12}N_{12}/\text{Qure}$ بسیار خوب بوده و بین کوئرتستین و سطح آن فولرن یک برهمکنش قوی و جذب شیمیایی بوجود آمده است. به عبارت دیگر سطح فولرن تمایلی زیادی به جذب کوئرتستین دارد و آن فولرن می تواند به عنوان

یک جاذب مناسب برای جذب کوئرستین عمل نماید. برای بررسی دقیقتر میزان انتقال بار بین مولکول کوئرستین با آن فولرن (QT) به کمک NBO آنالیز شده است. آنالیز NBO نشان می‌دهد که در جذب مولکول کوئرستین روی آن ساختار $B_{12}N_{12}$ ، حدود ۰.۳۵۶ الکترون از کوئرستین به $B_{12}N_{12}$ منتقل شده است که نشان دهنده آن است که بین کوئرستین و سطح فولرن یک برهمکنش قوی وجود دارد. نقشه های دانسیته الکترونی، ^۱LOL، و ^۲ELF نیز نشان دهنده آن است که بین کوئرستین و سطح فولرن یک برهمکنش قوی وجود دارد. همچنین خصوصیات ساختاری این فولرن از قبیل طول و زوایای پیوند در اثر جذب کوئرستین به مقدار قابل توجهی تغییر کرده است (نشان دهنده برهمکنش نسبتاً قوی کوئرستین با آن فولرن می‌باشد). نتایج بالا نشان می‌دهد که کوئرستین جذب شیمیایی روی آن فولرن شده و آن فولرن می‌تواند یک کاندیدای بالقوه ای برای جذب این مولکول عمل نماید و ممکن است تغییر قابل ملاحظه ایی روی فعالیت آنتی رادیکالی کوئرستین صورت گیرد.



شکل ۳. پارامترهای هندسی، PDOS و دانسیته الکترونی، LOL، و ELF برای ساختار بهینه شده $B_{12}N_{12}/Qure$ کمپلکس با استفاده از روش *B3PW91/6-31G. فاصله‌ها بر حسب آنگستروم

۲-۳. آنالیز مکانیسم های آنتی اکسیدانتهی مولکول کوئرستین روی $B_{12}N_{12}$ فولرن

وقتی فعل و انفعالات برخی مولکول‌ها با اکسیژن، طی فرآیندی به نام اکسیداسیون، دچار اختلال می‌شود رادیکال‌های آزاد ساخته می‌شود. رادیکال‌های آزاد اتم‌های ناپایداری هستند که برای پایدار کردن خودشان، از سلول‌های دیگر الکترون می‌دزدند و به آنها آسیب می‌زنند. ممکن است بعد از آن، سلول‌های آسیب‌دیده نیز تبدیل به رادیکال‌های آزاد شوند، و منجر به یک زنجیره واکنش‌های شیمیایی مخرب شوند. با این حال رادیکال‌های آزاد به‌طور طبیعی تولید می‌شود، چون بخشی از مکانیسم دفاعی بدن

¹ Localized orbital locator

² electron localization function

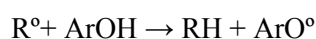
است. اگر بدن یک ویروس یا باکتری را شناسایی کند، رادیکال آزاد تولید می کند تا آن را از بین ببرد. سپس وقتی ماده‌ی بیگانه از بین رفت، بدن برای خنثی کردن رادیکال‌های آزاد آنتی‌اکسیدان تولید می کند. اما ممکن است تولید رادیکال‌های آزاد به دلایل مختلف از کنترل خارج شود. آلودگی هوا، دود، خوراکی‌های فرآوری‌شده، استرس، و حتی اشعه‌های مضر فرابنفش خورشید همه می‌تواند سبب تولید بیش از حد رادیکال‌های آزاد شود که منجر به استرس اکسیداتیو می‌شود. این‌جا است که اهمیت آنتی‌اکسیدان‌ها مشخص می‌شود. آنتی‌اکسیدان‌ها با خنثی کردن اثرات اکسیداسیون، زنجیره‌ی آسیب‌رسان واکنش‌های ناشی از وجود رادیکال‌های آزاد را متوقف می‌کنند، از این رو نام آن را آنتی‌اکسیدان (ضد اکسیدان) گذاشته‌اند. آنها بدون هیچ خطری فعل و انفعال انجام می‌دهند و قبل از این که رادیکال‌های آزاد آسیب بیشتری به سلول‌ها برسانند آنها را خنثی می‌کنند. آنتی‌اکسیدان‌ها برای این کار، الکترون از دست رفته‌ی رادیکال‌های آزاد را به آن می‌دهند، بدون این که خودشان تبدیل به رادیکال آزاد شوند. اکنون مشکل این است که به علت وجود عوامل خارجی که سبب تولید رادیکال‌های آزاد می‌شود، بدن نمی‌تواند به اندازه‌ی کافی آنتی‌اکسیدان تولید کند تا از پس رادیکال‌های آزاد بر بیاید. این عدم توازن، که در آن رادیکال‌های آزاد بیش‌تر از آنتی‌اکسیدانی است که بدن می‌تواند فراهم می‌کند، استرس اکسیداتیو نامیده می‌شود. در این وضعیت استرس اکسیداتیو، آسیب سلولی یا حتی مرگ سلول رخ می‌دهد. استرس اکسیداتیو طولانی می‌تواند فرآیند پیری را سرعت دهد و منجر به بیماری یا حتی سرطان شود. از این رو فقدان آنتی‌اکسیدان باید از طریق رژیم غذایی جبران شود [۱۹].

مکانیسم فعالیت آنتی‌اکسیدانها بر اساس سه روش شناخته شده زیر انجام می‌شود:

- 1- Hydrogen atom transfer (HAT)
- 2- Single electron transfer followed by proton transfer (SET-PT)
- 3- Sequential proton loss electron transfer (SPLET).

۳-۳. آنالیز مکانیسم HAT

در HAT مکانیسم، فلاونید (ArOH) از طریق تفکیک پیوند O-H خود بطور مستقیم با رادیکال‌های آزاد مطابق واکنش زیر برخورد کمی کند:



HAT مکانیسم توسط آنتالپی تفکیک پیوند O-H (BDE) مطابق فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$BDE = \Delta H (ArO^{\bullet}) + \Delta H (H^{\bullet}) - \Delta H (ArOH)$$

مقادیر کمتر BDE نشان دهنده فعالیت آنتی‌اکسیدانی بیشتر می‌باشد. مقادیر BDE برای هر یک از O-H های کوئرستین و کمپلکس B₁₂N₁₂/Qure در حلال‌های مختلف با استفاده از روش M062X/6-31G* در جدول (۱) آورده شده است. روش M062X/6-31G* برای محاسبات تراشیمی و انتراکشنهای غیر کوالانسی نتایج دقیق تری از روشهای دیگر دارد [۱۱-۱۲]. بنابراین برای محاسبات آنتی‌اکسیدانتی این ترکیبات از این روش استفاده شده است.

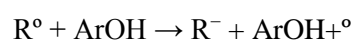
جدول ۱. آنتالپی تفکیک پیوند O-H (BDE) برای کوئرستین و کمپلکس B₁₂N₁₂/Que و همچنین اختلاف آنها با استفاده از روش *M062X-D3/6-31G بر حسب کیلو کالری بر مول

Solvent	BDE					B ₁₂ N ₁₂ -QUE complex					ΔBDE				
	QUE					B ₁₂ N ₁₂ -QUE complex									
	3O-H	3'O-H	4'O-H	5O-H	7O-H	3O-H	3'O-H	4'O-H	5O-H	7O-H	3O-H	3'O-H	4'O-H	5O-H	7O-H
Gas	۸۱/۴	۷۴/۰	۸۱/۰	۹۷/۶	۸۷/۲	۹۱/۲	۷۵/۸	۸۲/۶	۸۷/۷	۸۶/۳	۹/۸	۱/۸	۲/۶	-۹/۹	-۰/۹
Benzene	۸۰/۰	۷۴/۸	۸۰/۱	۸۶/۳	۸۷/۷	۸۹/۷	۷۶/۶	۸۲/۹	۸۷/۲	۸۶/۹	۹/۷	۱/۸	۲/۸	-۰/۹	-۰/۸
Ethanol	۷۷/۹	۷۸/۶	۷۹/۴	۸۷/۲	۹۰/۷	۸۵/۵	۸۰/۲	۸۲/۱	۸۷/۶	۹۰/۱	۷/۶	۱/۶	۲/۷	-۰/۴	-۰/۶
Water	۷۸/۶	۷۹/۹	۸۰/۴	۸۷/۸	۹۱/۸	۸۶/۲	۸۱/۵	۸۲/۱	۸۷/۸	۹۰/۸	۷/۶	۱/۶	۲/۷	-۰/۰	-۱/۰

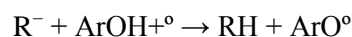
در کوئرستین و کمپلکس B₁₂N₁₂/Que کمترین مقادیر BDE برای گروه‌های مختلف O-H در حلال‌های گاز، بنزن، اتانول و آب مربوط به 3'O-H می‌باشد. در حقیقت، می‌توان تصور کرد که برای این ترکیبات، گروه 3'O-H با بیشترین احتمال مکانیسم HAT را انجام می‌دهد. همچنین مقادیر منفی ΔBDE (اختلاف بین کوئرستین و کمپلکس) برای گروه 5O-H در فاز گازی و گروه 7O-H در همه فازها نشان می‌دهد که کمپلکس B₁₂N₁₂/Que در این گروه‌ها از فعالیت آنتی‌اکسیدانی بیشتری برخوردار است. به عبارت دیگر جذب کوئرستین روی B₁₂N₁₂ فولرن باعث افزایش فعالیت آنتی‌اکسیدانی در این گروه‌ها شده است.

۴-۳. آنالیز مکانیسم SET-PT

در مکانیسم SET-PT، در مرحله اول، یک الکترون از آنتی‌اکسیدان به رادیکال آزاد منتقل می‌شود و رادیکال کاتیونی را به شرح زیر تشکیل می‌دهد:



این واکنش از نظر ترمودینامیکی برای مکانیسم SET-PT قابل توجه و مهم است و با پتانسیل یونیزاسیون (IP) مشخص می‌شود. در مرحله بعد، یک پروتون از رادیکال کاتیون فلاونوئید جدا شده و توسط آنتالپی تفکیک پروتون (PDE) مشخص می‌شود.



IP و PDE به شرح زیر محاسبه شد:

$$IP = \Delta H (ArOH^{+\circ}) + \Delta H (e^{-}) - \Delta H (ArOH)$$

$$PDE = \Delta H (ArO^{\circ}) + \Delta H (H^{+}) - \Delta H (ArOH^{+\circ})$$

IP و PDE کمتر به ترتیب نشان دهنده از دست دادن راحت الکترون از آنتی‌اکسیدان و پروتون از رادیکال کاتیون آنتی‌اکسیدان است، یعنی نشان دهنده فعالیت آنتی‌اکسیدانی بیشتر می‌باشد [۲۰]. مقادیر IP، ΔIP، PDE و ΔPDE برای مولکول کوئرستین و

کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ در فاز گاز و حلالهای مختلف با استفاده از روش $M062X-D3/6-31G^*$ محاسبه شده و در جدول (۲) و (۳) خلاصه شده است.

جدول ۲. مقادیر IP و ΔIP برای کوئرتستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ با استفاده از روش $M062X-D3/6-31G^*$

Solvent	QUE	$B_{12}N_{12}-QUE$ complex	ΔIP
	IP	IP	
Gas	۶/۱۶۴	۴/۱۵۵	-۲/۹
Benzene	۱/۱۴۴	۴/۱۳۷	-۶/۷
Ethanol	۴/۱۲۸	۸/۱۲۳	-۴/۶
Water	۲/۱۲۸	۸/۱۳۳	۵/۶

جدول ۳. مقادیر PDE و ΔPDE برای کوئرتستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ با استفاده از روش $M062X-D3/6-31G^*$

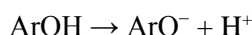
Solvent	PDE										ΔPDE				
	QUE					$B_{12}N_{12}-Que$ complex					30-H	3'O-H	4'O-H	50-H	70-H
	30-H	3'O-H	4'O-H	50-H	70-H	30-H	3'O-H	4'O-H	50-H	70-H					
Gas	۴/۲۳۳	۰/۲۲۶	۰/۲۳۳	۶/۲۴۹	۲/۲۳۹	۱/۲۵۲	۶/۲۳	۴/۲۴	۶/۲۴۸	۲/۲۴۷	۱۸/۷	۱۰/۶	۴/۱۱	-۰/۱	۰/۸
Benzene	۷/۳۶	۵/۳۱	۸/۳۶	-۰/۴۳	۴/۴۴	-۰/۵۳	۹/۳۹	۱/۴۶	۵/۵۰	۲/۵۰	۳/۱۶	۴/۸	۳/۹	۵/۷	۵/۸
Ethanol	-۰/۱۴	۷/۱۴	۵/۱۵	۳/۲۳	۸/۲۶	۱/۲۶	۸/۲۰	۷/۲۲	۲/۲۸	۷/۳۰	۱/۱۲	۱/۶	۲/۷	۴/۹	۳/۹
Water	۱/۱۹	۴/۲۰	۹/۲۰	۴/۲۸	۳/۳۲	۲/۲۱	۵/۱۶	۱/۱۸	۸/۲۲	۸/۲۵	۱/۲	-۳/۹	-۲/۸	-۵/۶	-۶/۵

جدول (۲) و (۳) نشان می‌دهد که مقادیر IP و PDE که در حلالهای قطبی (اتانول و آب) محاسبه شده است، کمتر از حلالهای غیر قطبی (گاز و بنزن) هستند و نسبت به تغییر قطبیت حلالها حساس هستند. به عبارت دیگر، توانایی اهدای الکترونی و توانایی اهدا پروتون مولکول کوئرتستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ در حلالهای قطبی بیشتر است. همچنین مقادیر ΔIP ($IP_{B_{12}N_{12}/Que} - IP$) در فاز گاز، بنزن و اتانول منفی هستند، نشان می‌دهد که تشکیل رادیکال کاتیون در کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ از مولکول کوئرتستین در این فازها آسانتر است و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ در اولین قدم از مکانیسم SET-PT فعال تر می‌باشد. در مرحله دوم مکانیسم SET-PT، کمترین مقادیر PDE برای گروههای مختلف O-H در حلالهای گاز، بنزن، اتانول و آب مربوط به 3'O-H می‌باشد (مشابه توالی BDE ها برای این ترکیبات است). بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که گروه 3'O-H مولکول کوئرتستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ دارای پایدارترین کاتیون در سیستمهای مورد مطالعه است. از طرف دیگر، مقادیر ΔPDE ($PDE_{PDE\ Que} - PDE_{B_{12}N_{12}/Que}$) در فاز آبی منفی است، نشان می‌دهد که توانایی ازدست دادن پروتون از رادیکال کاتیون کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ آسانتر از کوئرتستین مولکول می‌باشد. و در نتیجه فعالیت آنتی‌اکسیدانی کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ در فاز آبی بیشتر

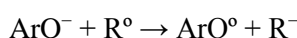
از کوئرتستین می‌باشد. نتایج بالا نشان می‌دهد که جذب کوئرتستین روی $B_{12}N_{12}$ فولرن باعث افزایش فعالیت آنتی‌اکسیدانی در گروه های O-H کوئرتستین شده است.

۳-۵. آنالیز مکانیسم SPLET

در این مکانیسم، ابتدا یک پروتون از فلاونونوئید (ArOH) و شکست پیوند O-H و آنیون فلاونید مطابق واکنش زیر تشکیل می‌شود:



PA پارامتر مهمی است که توانایی جدا شدن پروتون را نشان می‌دهد. در مرحله دوم، یک الکترون از آنیون به رادیکال آزاد طبق واکنش زیر منتقل می‌شود و با آنالیزی انتقال الکترون (ETE) مشخص می‌شود:



معادلات مربوط به PA و ETE به شرح زیر است:

$$PA = \Delta H (ArO^-) + \Delta H (H^+) - \Delta H (ArOH)$$

$$ETE = \Delta H (ArO^\circ) + \Delta H (e^-) - \Delta H (ArO^-)$$

مقادیر محاسبه شده PA، ΔPA ، ETE و ΔETE برای مولکول کوئرتستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ در فاز گاز و حلالهای مختلف در جدول ۴ و ۵ ارائه شده است.

جدول ۴. مقادیر PA و ΔPA برای کوئرتستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ بر حسب کیلوکالری بر مول با استفاده از روش *M062X-D3/6-31G

Solvent	PA										ΔPA				
	QUE					$B_{12}N_{12}-QUE$ complex					3O-H	3'O-H	4'O-H	5O-H	7O-H
	3O-H	3'O-H	4'O-H	5O-H	7O-H	3O-H	3'O-H	4'O-H	5O-H	7O-H					
Gas	۳/۳۴۸	۵/۳۳۶	۵/۳۴۳	۱/۳۳۴	۲/۳۳۰	۹/۳۲۹	۹/۳۱۷	۹/۳۱۶	۹/۳۱۲	۰/۳۰۸	-۴/۲	-۶/۱۸	-۶/۲۶	-۲/۲۱	-۲/۲۲
Benzene	۶/۱۱۰	۴/۹۹	۳/۱۰۶	۱/۹۸	۲/۹۵	۷/۹۸	۹/۸۸	۰/۸۸	۸/۸۳	۴/۸۰	-۹/۱	-۵/۱۰	-۳/۱۸	-۳/۱۴	-۸/۱۴
Ethanol	۰/۴۸	۴/۴۳	۰/۴۶	۴/۴۱	۲/۴۱	۵/۴۳	۲/۴۱	۰/۳۹	۸/۳۵	۱/۳۵	-۴/۵	-۲/۲	-۰/۲	-۵/۶	-۱/۶
Water	۰/۴۹	۴/۴۵	۶/۴۷	۲/۴۳	۶/۴۳	۵/۴۵	۷/۴۳	۸/۴۱	۰/۳۸	۲/۳۸	-۵/۳	-۷/۱	-۸/۵	-۲/۵	-۴/۵

جدول ۵. مقادیر ETE و ΔETE برای کوئرتستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ بر حسب کیلوکالری بر مول با استفاده از روش *M062X-D3/6-31G

Solvent	ETE										ΔETE				
	QUE					$B_{12}N_{12}-QUE$ complex					3O-H	3'O-H	4'O-H	5O-H	7O-H
	3O-H	3'O-H	4'O-H	5O-H	7O-H	3O-H	3'O-H	4'O-H	5O-H	7O-H					
Gas	۱/۴۷	۵/۵۱	۵/۵۱	۶/۷۲	۱/۷۱	۴/۷۵	۹/۷۱	۸/۸۰	۹/۸۸	۴/۹۲	۳/۲۸	۴/۲۰	۳/۲۹	۳/۱۱	۳/۲۱
Benzene	۰/۶۸	۰/۷۴	۴/۷۲	۸/۸۶	۱/۹۱	۶/۸۹	۳/۸۶	۵/۹۳	۰/۱۰	۱/۱۰	۶/۲۱	۳/۱۲	۱/۲۱	۲/۱۵	۰/۱۴
Ethanol	۴/۹۲	۸/۹۷	۹/۹۵	۳/۰۸	۰/۱۲	۴/۱۵	۵/۱۰	۵/۱۰	۳/۱۱	۴/۱۲	۰/۱۲	۳/۷	۶/۹	۰/۶	۴/۵
Water	۴/۹۶	۳/۱۰	۶/۹۹	۵/۱۱	۰/۱۱	۵/۱۱	۶/۱۰	۰/۱۱	۶/۱۲	۳/۱۲	۱/۱۱	۳/۳	۴/۸	۱/۵	۳/۴

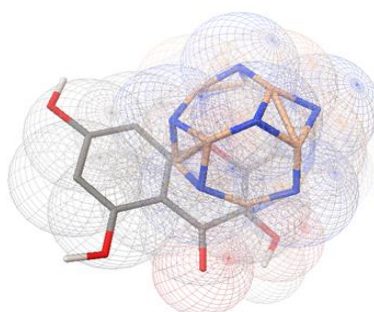
همانطور که در جدول (۴) نشان داده شده است، مقادیر PA مولکول کوئرتستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ به طور چشمگیری از فاز گاز به فاز حلال کاهش می‌یابد و نسبت به تغییر قطبیت حلالها بسیار حساس هستند. همچنین، توالی PA برای گروه های OH در این ترکیبات در فازهای مختلف نشان می‌دهد که گروه های 7O-H تقریباً اسیدی ترین هیدروژن می‌باشد و جدا شدن هیدروژن آن پایدارترین آنیون در سیستم های مورد مطالعه را تشکیل می‌دهد و گروه های 7O-H در این ترکیبات نقش مهمی در مرحله اول مکانیسم SPLET دارند. از طرف دیگر، مقادیر $\Delta PA(PAB_{12}N_{12}/Que - PAQue)$ در همه آن فازها و خصوصاً در فاز گاز منفی است منفی بودن ΔPA نشان می‌دهد که مقدار PA کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ از کوئرتستین کوچکتر است در نتیجه فعالیت آنتی‌اکسیدانی بالاتری از کوئرتستین دارد. این نتایج تأیید می‌کنند که جذب مولکول کوئرتستین در فولرن $B_{12}N_{12}$ می‌تواند فعالیت ضدرادیکالی مولکول کوئرتستین را تقویت کند. تجزیه و تحلیل جدول ۵ نشان می‌دهد که مقادیر ETE مولکول کوئرتستین از کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ کوچکتر است (ΔETE مثبت است). این بدان معنی است که مولکول کوئرتستین در مرحله دوم مکانیسم SPLET از کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ فعال تر است.

۳-۶. داکینگ مولکولی حاصل از برهمکنش کوئرتستین با فولرن بور-نیتريد

داکینگ مولکولی یکی از روش‌های متداول جهت بررسی نحوه واکنش بین رسپتور و لیگاند می‌باشد، بنابراین، از این روش جهت بررسی نحوه اتصال کوئرتستین بر سطح فولرن بور-نیتريد استفاده شد [۲۱-۲۲]. نتایج حاصل از داکینگ Ki (ثابت مهارکنندگی) و انرژی اتصال جدول (۶)، نتایج حاصل از روش مکانیک کوانتومی در برهمکنش کوئرتستین با فولرن بور-نیتريد را تأیید می‌کنند.

جدول ۶. نتایج حاصل از داکینگ مولکولی برهمکنش کوئرتستین با فولرن بور-نیتريد

کمپلکس	انرژی اتصال	سهم انرژی واندروالس (KJ/mol)	سهم انرژی الکترواستاتیک (Kj/mol)	ثابت مهارکنندگی (Ki)
کوئرتستین-فولرن	-۰/۶۱	-۲/۲۱	-۰/۰۵	۳۸۵/۴۶



شکل ۴. برهمکنش لیگاند کوئرتستین اسید با فولرن بورنیتريد

۴. نتیجه گیری

در این مطالعه به طور خلاصه با کمک محاسبات نظریه تابعیت چگالی (DFT)، جذب مولکول کوئرستین روی سطح فولرن $B_{12}N_{12}$ مورد بررسی قرار گرفت. مقدار انرژی جذب کوئرستین روی سطح فولرن $B_{12}N_{12}$ با استفاده از روشهای B3PW91-D و M06-2X-D3 ۱۹/۲۵۶-۵۵/۲۵۶ کیلو کالری بر مول محاسبه و بین کوئرستین و سطح آن فولرن یک برهمکنش قوی با جذب شیمیایی بوجود آمده است. به عبارت دیگر سطح فولرن تمایلی زیادی به جذب کوئرستین دارد و آن فولرن می تواند به عنوان یک جاذب مناسب برای جذب کوئرستین عمل نماید. فعالیت آنتی اکسیدانی مولکول کوئرستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ بر اساس مکانیسم های HAT، SET-PT و SPLET بررسی شده است. برای این منظور، مقادیر BDE، IP، PDE، PA و ETE در فازهای گازی، بنزن، اتانول و آب محاسبه شدند تا بتوانند ویژگیهای آنتی اکسیدانی ترکیبات مورد بررسی بهتر درک شوند. نتایج حاصله بدین شرح می باشد:

در کوئرستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ کمترین مقادیر BDE برای گروههای مختلف O-H در حلالهای گازی، بنزن، اتانول و آب مربوط به 3'O-H می باشد و گروه 3'O-H با بیشترین احتمال مکانیسم HAT را انجام می دهد. مقادیر منفی ΔBDE برای گروه 5O-H در فاز گازی و گروه 7O-H در همه فازها نشان میدهد که کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ در این گروهها از فعالیت آنتی اکسیدانی بیشتری برخوردار است. به عبارت دیگر جذب کوئرستین روی $B_{12}N_{12}$ فولرن باعث افزایش فعالیت آنتی اکسیدانی در این گروهها شده است. مقادیر IP و PDE در حلالهای قطبی (اتانول و آب) کمتر از حلالهای غیر قطبی (گاز و بنزن) هستند و آنها نسبت به تغییر قطبیت حلالها حساس هستند. مقادیر ΔIP در فاز گازی، بنزن، و اتانول منفی هستند، نشان می دهد که تشکیل رادیکال کاتیون در کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ از مولکول کوئرستین در این فازها آسانتر است و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ در اولین قدم از مکانیسم SET-PT فعال تر می باشد. کمترین مقادیر PDE برای گروههای مختلف O-H در حلالهای گازی، بنزن، اتانول و آب مربوط به 3'O-H می باشد. مقادیر ΔPDE در فاز آبی منفی است و در نتیجه فعالیت آنتی اکسیدانی کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ در فاز آبی بیشتر از کوئرستین می باشد. مقادیر PA مولکول کوئرستین و کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ به طور چشمگیری از فاز گاز به فاز حلال کاهش می یابد و نسبت به تغییر قطبیت حلالها بسیار حساس هستند. گروه های 7O-H تقریباً اسیدی ترین هیدروژن می باشد و این گروهها نقش مهمی در مرحله اول مکانیسم SPLET دارند. مقادیر ΔPA در همه آن فازها و خصوصاً در فاز گاز منفی است و مقدار PA کمپلکس $B_{12}N_{12}/Que$ از کوئرستین کوچکتر است در نتیجه فعالیت آنتی اکسیدانی بالاتری از کوئرستین دارد.

این نتایج تأیید می کنند که جذب مولکول کوئرستین در فولرن $B_{12}N_{12}$ می تواند فعالیت ضد رادیکالی مولکول کوئرستین را تقویت کند و در نتیجه فعالیت آنتی اکسیدانی کوئرستین در اثر جذب روی سطح $B_{12}N_{12}$ فولرن افزایش می یابد. داکینگ مولکولی نیز این نتایج را تأیید می کنند.

۵. مراجع

- [1] Di Carlo, G., Mascolo, N., Izzo, A. A., & Capasso, F. (1999). Flavonoids: old and new aspects of a class of natural therapeutic drugs. *Life sciences*. 65(4), 337-353.
- [2] Shahidi, F., Janitha, P. K., & Wanasundara, P. D. (1992). Phenolic antioxidants. *Critical reviews in food science & nutrition*. 32(1), 67-103.
- [3] Jovanovic, S. V., Steenken, S., Tomic, M., Marjanovic, B., & Simic, M. G. (1994). Flavonoids as antioxidants. *Journal of the American Chemical Society*. 116(11), 4846-4851.
- [4] RA, G, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b., & Mennucci, ga petersson, gaussian. (2009). Inc, Wallingford CT. 121, 150-66.
- [5] Ganguly, G., Malakar, T., & Paul, A. (2016). In Pursuit of Sustainable Hydrogen Storage with Boron-Nitride Fullerene as the Storage Medium. *ChemSusChem*. 9(12), 1386-1391.
- [6] Kantoury, M., Eslami Moghadam, M., Tarlani, A. A., & Divsalar, A. (2016). Structure effect of some new anticancer Pt (II) complexes of amino acid derivatives with small branched or linear hydrocarbon chains on their DNA interaction. *Chemical Biology & Drug Design*. 88, 76-87.
- [7] Xu, L., Hu, Y. X., Li, Y. C., Liu, Y. F., Zhang, L., Ai, H. X., & Liu, H. S. (2017). Study on the interaction of paeoniflorin with human serum albumin (HSA) by spectroscopic and molecular docking techniques. *Chemistry Central Journal*, 11, 116-128.
- [8] Aghaee, E., Ghasemi, J. B., Manouchehri, F., & Balalaie, S. (2014). Combined docking, molecular dynamics simulations and spectroscopic studies for the rational design of a dipeptide ligand for affinity chromatography separation of human serum albumin. *Journal of Molecular Modeling*, 20, 2446-2459.
- [9] Sohrabi, N., Rasouli, N., & Raissi, M. (2017). Study the interaction of Ni complex of tetradentate schiff base ligand with hen egg white lysozyme. *Physical and Chemical Research*. 5, 113-123.
- [10] Fu, X. B., Liu, D. D., Lin, Y., Hu, W., Mao, Z. W., & Le, X. Y. (2014). Water-soluble DNA minor groove binders as potential chemotherapeutic agents: synthesis, characterization, DNA binding and cleavage, antioxidation, cytotoxicity and HSA interactions. *Dalton Transactions*. 43, 8721-8737.
- [11] Lakhanpal, P., & Rai, D. K. (2007). Quercetin: a versatile flavonoid. *Internet Journal of Medical Update*. 2(2), 22-37.
- [12] Materska, M. (2008). Quercetin and its derivatives: chemical structure and bioactivity-a review. *Polish journal of food and nutrition sciences*, 58(4) .
- [13] Chuang, C. W., & Shih, J. S. (2001). Preparation and application of immobilized C60-glucose oxidase enzyme in fullerene C60-coated piezoelectric quartz crystal glucose sensor. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 81(1) 1-8.
- [14] Chou, F. F., Chang, H. W., Li, T. L., & Shih, J. S. (2008). Piezoelectric crystal/surface acoustic wave biosensors based on fullerene C60 and enzymes/antibodies/proteins. *Journal of the Iranian Chemical Society*. 5(1) 1-15.
- [15] Lin, L. H., & Shih, J. S. (2011). Immobilized Fullerene C60-Enzyme-Based Electrochemical Glucose Sensor. *Journal of the Chinese Chemical Society*. 58(2), 228-235.
- [16] Harismah, K., Ozkendir, O. M., & Mirzaei, M., (2020). Lithium adsorption at the C20 fullerene-like cage: DFT approach. *Advanced Journal of Science and Engineering*. 1(3), 74-79.
- [17] Zheng, Y. Z., Deng, G., Chen, D. F., Guo, R., & Lai, R. C., (2019). The influence of C2C3 double bond on the antiradical activity of flavonoid: Different mechanisms analysis. *Phytochemistry*. 157, 1-7.
- [18] Baei, M. T. (2013). Remove of toxic pyridine from environmental systems by using B12N12 nano-cage. *Superlattices and Microstructures*. 58, 31-37.

- [19] Grebowski, J., Konopko, A., Krokosz, A., DiLabio, G. A., & Litwinienko, G. (2020). Antioxidant activity of highly hydroxylated fullerene C60 and its interactions with the analogue of α -tocopherol. *Free Radical Biology and Medicine*. 160, 734-744.
- [20] Khalili, A., Baei, M. T., & Hosseini Ghaboos, S.H., (2020). Improvement of Antioxidative Activity of Apigenin by B12N12 Nanocluster: *Antioxidative Mechanism Analysis*. *ChemistrySelect*. 5(6), 1829-1836.
- [21] Singh, S. P., & Konwar, B. K. (2012). Molecular docking studies of quercetin and its analogues against human inducible nitric oxide synthase. *SpringerPlus*. 1(1), 1-10.
- [22] Maharani, M. G., Lestari, S. R., & Lukiati, B. (2020). Molecular docking studies flavonoid (quercetin, isoquercetin, and kaempferol) of single bulb garlic (*Allium sativum*) to inhibit lanosterol synthase as anti-hypercholesterol therapeutic strategies. *In AIP Conference Proceedings* 2231, 040021-6.

Molecular Docking and DFT Study On the Interaction Between Quercetin on surface B₁₂N₁₂ Fullerene

Kh. Tavakoli hafshejani¹, T. Shahi², M.T.Baei³

¹ Department of Chemistry, Faculty of Science, Shahrekord Branch, Islamic Azad University, Shahrekord, Iran

² Department of Agricultural Machinery, Azadshahr Branch, Islamic Azad University, Azadshahr, Golestan, Iran, Iran

³Department of Chemistry, Azadshahr Branch, Islamic Azad University, Azadshahr, Golestan, Iran

Submitted: 01 December 2022, Revised: 07 February 2023, Accepted: 07 March 2023

Abstract

Adsorption and antiradical activity of quercetin molecule on B₁₂N₁₂ fullerene surface have been investigated with the help of density functional theory (DFT) in B3PW91-D and M06-2X-D methods. Adsorption values and topologies analysis showed that this molecule is adsorbed to the B₁₂N₁₂ fullerene surface and causes significant changes in the electronic properties of the fullerene. The antioxidant activities of quercetin molecule and B₁₂N₁₂/Que complex have been investigated using M06-2X-D level of theory based on hydrogen atom transfer (HAT), single electron transfer followed by proton transfer (SET-PT) and SPLET method. To better understand the antioxidant properties, the values of bond dissociation enthalpy (BDE), ionization potential (IP), proton dissociation enthalpy (PDE), proton affinity (PA) and electron transfer enthalpy (ETE) of quercetin on the B₁₂N₁₂ fullerene surface in gas, benzene, Ethanol and water have been calculated. The results showed that in gas and solvent phases, the adsorption of quercetin on B₁₂N₁₂ fullerene increased the antioxidant activity of quercetin, the interaction energy and inhibition constant in the molecular docking method also confirm these results.

Keywords: quercetin; anti-radical activity; antioxidant mechanisms; fullerenes; Density functional theory (DFT), molecular docking.