



## بررسی محاسباتی تاثیر نانو اکسید قلع بر خواص ترمودینامیکی داروی مفدرون

رویا احمدی\*، اشرف سادات شاه ولایتی، شبنم ششمانی، معصومه سیمین قد

گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی، یادگار امام خمینی (ره) شهر ری، شهرری، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۹۸/۰۲/۱۲، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۹۸/۰۵/۲۵، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۹۸/۰۶/۱۳

### چکیده

مفدرون دارویی است که با تاثیر گذاری بر پیام رسان های عصبی مغز سرعت ارتباط بین مغز و بدن را افزایش می دهد. جذب سطحی نانو اکسید قلع با این ماده محرک سبب افزایش عملکردهای این دارو می شود. در این مطالعه، جذب سطحی نانو اکسید قلع با ماده ی محرک ی مفدرون در فاز حلال آب از روش مدل گازی پیوستار (PCM) به روش نظریه تابعی چگالی (DFT) مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور، ابتدا ساختار داروی محرک مفدرون و مشتقات آن با نانو اکسید قلع و تاثیر آن بر سیستم دستگاه عصبی را با سطح محاسبات  $6-316^*$  و توابع هیبریدی B<sub>3</sub>LYP مورد بهینه سازی هندسی قرار گرفتند. سپس محاسبات IR، مطالعات NBO، و محاسبات اوربیتال مولکولی از جمله بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) و همچنین پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (LUMO) و به منظور بررسی پارامترهای از جمله سختی، نرمی و پتانسیل شیمیایی و آنالیز اواییتال مولکولی بر روی آنها صورت گرفت. و همچنین پارامترهای ترمودینامیکی محاسبه شده از جمله تغییرات انرژی آزاد گیبس ( $\Delta G_f$ )، تغییرات آنتالپی تشکیل ( $\Delta H_f$ ) نشان دادند که جذب سطحی مفدرون با نانو اکسید قلع گرما زا، خودبخودی، یک طرفه و غیر تعادلی می باشد.

واژه های کلیدی: مفدرون، NBO، نظریه تابع چگالی، نانو اکسید قلع، جذب سطحی

### ۱. مقدمه

عناصر فلزی می توانند ترکیبات متنوعی از اکسیدهای فلزی را تحت شرایط خاص به وجود آورند. کاتالیزور هدایتی مورد استفاده در صنایع شیمیایی شامل یک اکسید به عنوان یک فلز فعال پشتیبان کننده می باشند. اکسیدهای فلزی از نظر ساختاری با توجه به الگوهای مختلف کریستالی معروف شده اند و اتصال عناصر به صورت یونی و فلزی می باشد. نانوذرات اکسیدی که عمدتاً نانوذرات اکسیدی سرامیکی هم نامیده می شوند شامل محدوده وسیعی از نانوذرات می گردند. نانو اکسیدها کاربردهای زیادی در زمینه هایی

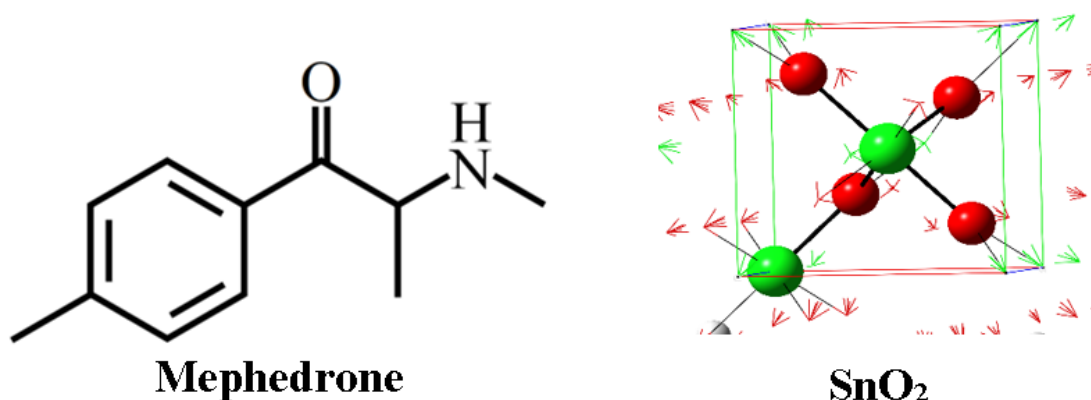
\*عهده دار مکاتبات: رویا احمدی

نشانی: گروه شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی، شهر ری، ایران

پست الکترونیک: E-mail: i.j.new.chemistry@gmail.com

تلفن: ۰۹۱۲۲۹۷۶۰۵۵

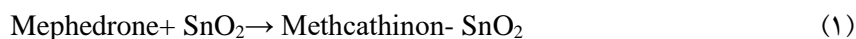
گوناگون از جمله: الکترونیک، مغناطیس، اپتیک، محصولات آرایشی، پزشکی، انرژی و محیط زیست دارند اکسید قلع (IV) دارای باند گپ  $3/9$  الکتروولت در  $377$  درجه کلوین است و از نوع نیمه رسانای نوع n می باشد. اکسید قلع (II) دارای کاربردهای زیادی از جمله در پیل های خورشیدی سوپرکازن ها به عنوان کاتالیزور به عنوان فوتوکاتالیست در حسگرهای گازی پوششی برای صرفه جویی در انرژی دستگاههای الکترونیکی، صفحه نمایش، کریستال مایع و سلول هدایتی سوختی دارد. نانو اکسید قلع از روشهای مختلفی از جمله رسوب دهی یکنواخت، تجزیه حرارتی هیدروترمال، رسوب دهی الکتریکی و سل- ژل سنتز می شود. اندازه و شکل این ذرات اکسیدی می تواند تأثیری بسیار زیاد بر نوع عملکرد و سرعت کارایی آنها داشته باشد حذف سریعتر آلاینده های رنگی زیست محیطی با بهینه سازی نانوذرات اکسید قلع (IV) امکان پذیر است. اکسید قلع یک ماده ی شیمیایی غیر آلی است که با فرمول شیمیایی SnO و  $SnO_2$  نشان داده می شود و به رنگ سفید و دانه بندی شکر می باشد. جرم مولی آن  $134/71$  g/mol می باشد. شکل ظاهری این ترکیب، جامد نارنجی و قرمز است. چون این ماده پایه ساخت بقیه مشتقات قلع می باشد و با ساخت این ماده می توان تمام مشتقات قلع را تهیه نمود. با توجه به خصوصیات اشکار اکسید قلع می توان اثر جذب سطحی نانو اکسید قلع را بر داروی محرک مفدرن بررسی کرد. مفدرن داروی مقلد سمپاتیک یا محرک سیستم عصبی مرکزی نیز معروف است. از دسته گروه های داروهای محرک آمفتامین ها و متامفتامین ها است. برخی از انواع آمفتامین ها به صورت قانونی توسط پزشکان برای بیماری هایی چون (اختلال کاهش تمرکز و بیش فعالی) و یا (حمله خواب) تجویز می شود. و نیز در درمان نارکولپسی و افسردگی کاربرد دارد. با مصرف دوزهای پایین و درست داروی مفدرن تحت نظر تجویز پزشک باعث بهبود توجه، عملکرد، کاهش خستگی، کاهش خواب و بالا رفتن آستانه درد می شود. و در کل هدف از بهینه سازی سطحی نانو اکسید قلع و هدفمندسازی آن افزایش تاثیرات این دارو بر سلول های عصبی بدن و کاهش عوارض جانبی است. ساختار شیمیایی آن در شکل (۱) آورده شده است. در این تحقیق تاثیر جذب سطحی دارو و ایزومرهای آن بر ویژگی های ترمودینامیکی داروی مفدرن برای نخستین بار بصورت محاسباتی مورد بررسی قرار گرفت [۱-۱۹].



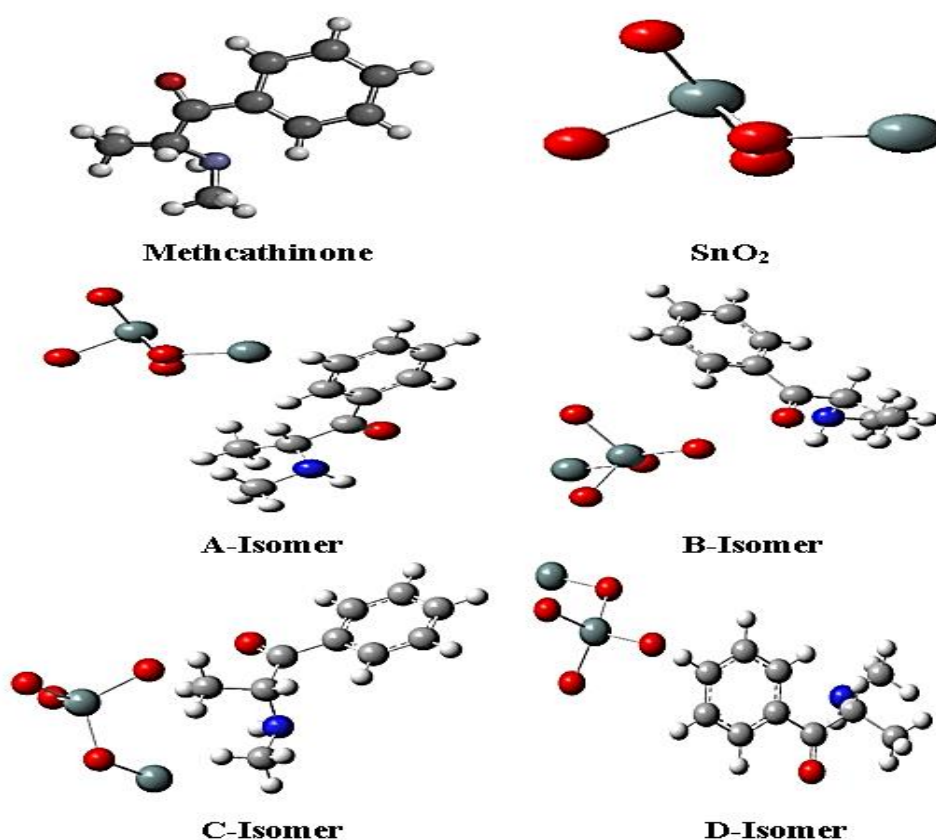
شکل ۱. تصاویر بهینه شده ماده مفدرن Mephedrone و نانو اکسید قلع در سطح \*B3lyp/6-31g و در فاز حلال آب

## ۲. روشهای محاسباتی

ابتدا ساختار داروی مفدرون، نانو اکسید قلع و مشتقات حاصل از جذب سطحی نانو ساختار با داروی مفدرون ذکر شده در چهار حالت متفاوت با استفاده از نرم افزار های Nanotube Modelr، Gauss View 6.1 رسم و محاسبه و روی چهار ایزومر و همچنین نانو اکسید قلع انجام شد و ساختار بهینه آنها بدست آمد. سپس هر یک از این ایزومرها از جهت های گوناگون با نانو اکسید قلع واکنش داده و انرژی جذب و دیگر خواص ترمودینامیکی با استفاده از معادله (۱) توسط نرم افزار Spartan محاسبات انجام شده است. در مرحله بعدی محاسبات بهینه سازی هندسی، IR و اوربیتال های مولکولی بر روی آنها با استفاده از روش تئوری تابع چگالی و سری پایه 6-31g\* با توابع هیبریدی B<sub>3</sub>LYP صورت گرفت [۲۷-۲۰]. این سری پایه به این دلیل انتخاب گردید که در گزارش های پیشین نتایج حاصل از آن تطابق و هماهنگی خوبی با داده های تجربی داشت. تمامی محاسبات در گستره دمایی ۲۷۳ الی ۳۷۳ کلوین در فواصل دمایی ۱۰° و با استفاده از نرم افزار اسپارتان انجام شد. واکنش های مورد بررسی به طور کلی به شرح زیر بودند:



انرژی جذب بین داروی مفدرون و نانو اکسید قلع طبق رابطه (۲) به دست آمده است



شکل ۲. ساختار بهینه شده مفدرون، SnO<sub>2</sub> و مشتقات مفدرون با نانو اکسید قلع SnO<sub>2</sub>

## ۳. نتایج و بحث

## ۳-۱. بررسی خواص ساختاری

همانطور که در شکل های شماره (۲) می توان ملاحظه نمود مفدرون در چهار موقعیت به نانو اکسید قلع  $\text{SnO}_2$  نزدیک شده است. همانگونه که در داده های موجود در جداول قابل ملاحظه است، چگالی مفدرون پس از جذب به نانو اکسید قلع افزایش یافته است. سایر ویژگی های ساختاری از جمله سطح و انرژی نقطه صفر نیز بعد از جذب نانو اکسید قلع، افزایش چشمگیری یافته اند و همچنین طول پیوند در موقعیت D-Isomer نسبت به موقعیت های دیگر بلندتر و بیشتر است به عبارتی طول پیوند سست تر گشته اند و راحت تر گسسته می شوند و جذب بین مفدرون و مشتقات آن آسانتر است و طول پیوند A-Isomer کمترین مقدار است. با توجه به اینکه مشتقات دارو دارای انرژی کمتری نسبت به داروی خالص هستند، انتظار می رود که این ترکیبات پایداری بیشتری نسبت به داروی تنها داشته باشند [۲۸-۳۷].

جدول ۱. مقادیر انرژی کل، انرژی نقطه صفر، سطح، جرم، حجم و چگالی برای مفدرون و مشتقات آن با نانو اکسید قلع  $\text{SnO}_2$ 

	Mephedrone	A-Isomer	B-Isomer	C-Isomer	D-Isomer
Adsorption energy (kJ/mol)	-	415.662	875.480	402.554	415.660
zero-point energy (KJ/mol)	621.37	655.61	655.61	655.61	634.85
Area ( $\text{\AA}^2$ )	215.51	280.29	280.29	280.29	286.78
weight (amu)	163.220	464.636	464.636	464.636	464.64
volume ( $\text{\AA}^3$ )	196.88	268.48	268.48	268.48	275.21
Density = weight / volume ( $\text{amu}/\text{\AA}^3$ )	0.82911	1.73061	1.73061	1.73061	1.68829
Bond lengths (A)	-	2.10719	3.17209	2.38193	2.34306

## ۳-۲. محاسبه و بررسی مقادیر تغییرات آنتالپی جذب مفدرون

برای به دست آوردن مقادیر تغییرات آنتالپی از رابطه (۲) استفاده گردید. در این معادله،  $\Delta E^0$  تغییرات انرژی کل در فرآیند مورد نظر می باشد که از کم نمودن مجموع انرژی کل فرآورده های یک واکنش از مجموع انرژی کل مواد اولیه به دست می آید.  $H_{th}$  نیز نشان نماد آنتالپی حرارتی برای هر یک اجزای تشکیل دهنده واکنش است.

$$\Delta H_{ad} = H_{\text{SnO}_2\text{-Mephedrone none}} - (H_{\text{SnO}_2} + \text{Mephedrone}) \quad (2)$$

همانطور که نتایج به دست آمده در جدول (۲) به وضوح نشان می دهند، جذب مفدرون گرما ده می باشد و انرژی از سیستم به محیط انتقال می یابد. مقادیر  $\Delta H_f$  به دست آمده برای تمامی مشتقات ذکر شده است. علاوه بر این به منظور بررسی تاثیر دما بر فرآیند جذب شدن، تمامی پارامترهای ترمودینامیکی در بازه دمایی ۲۷۳ الی ۳۷۳ کلوین در فواصل  $10^\circ$  محاسبه گشته و مقادیر آن گزارش گردیدند. همانطور که در جدول (۲) به وضوح مشخص است با افزایش دما میزان تغییرات آنتالپی تشکیل به تدریج افزایش می یابد. و دمای بهینه برای سنتز تمامی مشتقات ۲۷۳ کلوین می باشد و همانطور که مشاهده می شود در ایزومر B محسوس تر است.

جدول ۲. مقادیر تغییرات آنتالپی تشکیل واکنش استخلافی نانو اکسید قلع و مفدرون در فاز حلال در گستره دمایی ۲۷۳ الی ۳۷۳ کلوین

Temperature(K)	$\Delta H(KJ/mol)$			
	A. Isomer	B. Isomer	C. Isomer	D. Isomer
273.00	1206.476592	1650.210519	1587.416676	1146.037061
283.00	1207.218767	1491.149394	1587.429351	1145.979236
293.00	1207.951142	1651.971869	1427.511226	1145.911711
303.00	1208.703717	1652.874344	1587.488701	1145.864186
313.00	1209.477992	1653.805319	1587.557176	1145.838561
323.00	1210.237167	1654.727394	1587.532151	1145.697736
333.00	1211.022242	1655.651469	1587.617226	1145.682811
343.00	1782.702817	1656.567444	1587.600301	1145.589186
353.00	1212.616892	1657.488919	1587.663276	1145.577461
363.00	1213.384667	1658.415094	1587.631751	1148.181436
373.00	1214.149142	1214.149142	1587.703926	1145.409711

### ۳-۳. محاسبه و بررسی مقادیر تغییرات انرژی آزاد گیبس و مشتقات مفدرون با نانو اکسید قلع

معادله شماره (۳) برای محاسبه تغییرات انرژی آزاد گیبس ( $\Delta G_f$ ) مورد استفاده قرار گرفت. در این رابطه  $G_{th}$  انرژی آزاد گیبس حرارتی محاسبه شده توسط نرم افزار برای هر یک از اجزای واکنش است.  $\Delta E^0$  هم بیانگر تغییرات انرژی کل سیستم می باشد که از کم نمودن مجموع انرژی کل فرآورده های یک واکنش از مجموع انرژی کل واکنش دهنده ها می توان به دست آورد. نتایج به دست آمده که همگی در جدول (۳) ارائه شده اند، بیانگر این است که جذب سطحی مفدرون خودبخودی می باشد. مقدار  $\Delta G_f$  پس از فرآیند جذب کاهش شدیدی را تجربه نموده است. اما در کل با توجه به اینکه، مقدار این پارامتر در تمامی حالات به طور قابل ملاحظه ای محسوس می باشد، می توان انتظار داشت که واکنش تشکیل تمامی ترکیبات از لحاظ تجربی امکان پذیر باشد. تاثیر دما بر روی این کمیت هم مورد ارزیابی قرار گرفت، همانطور که مشخص است با زیاد شدن درجه حرارت میزان تغییرات انرژی آزاد گیبس نیز به صورت تدریجی افزایش می یابد. در نتیجه، به نظر می رسد که بالاترین راندمان سنتز در دمای اتاق یا ۲۷۳ درجه کلوین مشاهده گردد.

$$\Delta G_{ads} = G_{SnO_2-Methcatih\ none} - (G_{SnO_2} + G_{Mephedrone}) \quad (3)$$

### ۳-۴. محاسبه و بررسی مقادیر تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه جذب مفدرون

مقادیر ظرفیت گرمایی ویژه توسط نرم افزار Spartan در سطح  $B_3lyp$  برای دارو و مشتقات آن محاسبه شده است. طبق اطلاعات جدول شماره ۴ یک تفاوت مقدار بین داروی متکانتینون و ایزومرهای آن وجود دارد. به وضوح افزایش ظرفیت گرمایی را در ایزومرها نشان می دهد. اعداد بدست آمده نشان می دهد که در ایزومر B بیشترین مقدار عددی محاسبه شده است. ظرفیت گرمایی ارتباط مستقیمی با هدایت حرارتی دارد و همچنین نشان می دهد که هدایت گرمایی سبب جذب بهتر دارو می شود و می تواند به

عنوان یک سنسور حرارتی برای دارو عمل کند و همانطور که مشاهده می شود با افزایش دما میزان ظرفیت گرمایی ویژه در ایزومرها افزایش می یابد و در نتیجه با این افزایش دما و افزایش میزان ظرفیت گرمایی ایزومرها حساسیت دارو کاهش پیدا می کند.

جدول ۳. مقادیر تغییرات انرژی آزاد گیبس جذب سطحی مفدرون و مشتقات آنها با نانو اکسید قلع  $\text{SnO}_2$  در فاز حلال در گستره دمایی ۲۷۳ الی ۳۷۳ کلوین

Temperature(K)	$\Delta G(\text{KJ/mol})$			
	A. Isomer	B. Isomer	C. Isomer	D. Isomer
273.00	461.3423003	901.2300355	452.9320017	462.06023
283.00	463.8100984	900.0936254	450.9752002	463.81001
293.00	466.0687484	902.3462754	453.2344502	466.06876
303.00	468.5014484	904.7651754	455.6704502	468.50136
313.00	471.0557984	907.3105254	458.2231002	471.05581
323.00	473.4143984	909.6860254	460.6594002	473.41441
333.00	475.8658984	912.1428254	463.1839002	475.86581
343.00	478.4803984	914.6836254	465.7916002	478.48031
353.00	480.9750484	917.0880754	468.2893502	480.97496
363.00	483.4106484	919.4614754	470.7544502	483.41066
373.00	485.8732484	921.8701754	473.2371502	485.87326

جدول ۴. مقادیر تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه جذب سطحی مفدرون و مشتقات آن در فاز حلال در گستره دمایی ۲۷۳ الی ۳۷۳ کلوین

Temperature(K)	$CV(\text{J/mol})$				
	Mephedrone	A. Isomer	B. Isomer	C. Isomer	D. Isomer
273.00	159.0408	273.7784	292.3819	273.6501	273.7785
283.00	164.7683	280.5845	299.0128	280.4376	280.5846
293.00	170.4793	287.3261	305.5692	287.1621	287.3262
303.00	176.1680	294.0008	312.049	293.8207	294.0009
313.00	181.8283	300.6059	318.4501	300.4109	300.6061
323.00	187.4547	307.1385	324.7702	306.9294	307.1386
333.00	193.0417	313.5955	331.007	313.3734	313.5956
343.00	198.5841	319.974	337.1585	319.7398	319.9741
353.00	204.0769	326.2711	343.2226	326.0257	326.2712
363.00	209.5157	332.484	349.1973	332.2283	332.4841
373.00	214.8962	338.6102	355.081	338.3451	338.6104

جدول ۵. مقادیر انرژی جذب سطحی مفدرون و مشتقات آنها با نانو اکسید قلع  $\text{SnO}_2$  در فاز حلال در گستره دمایی ۲۷۳ الی ۳۷۳ کلوین

$E(\text{KJ/mol})$			
A-Isomer	B-Isomer	C-Isomer	D-Isomer
415.6621912	875.4809181	402.554293	415.6621027

### ۳-۵. تجزیه و تحلیل نتایج محاسبات اوربیتال‌های مولکولی

مهمترین اوربیتال‌های مولکولی مرزی (FMOs) از قبیل بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) و پایین‌ترین اوربیتال خالی مولکولی (LUMO) نقش تعیین‌کننده در پایداری شیمیایی مولکول دارد. HOMO نشان‌دهنده توانایی دادن الکترون و LUMO نشان‌دهنده توانایی پذیرفتن الکترون است. شکاف انرژی بین HOMO و LUMO تعیین‌کننده واکنش‌پذیری، قطبش‌پذیری نوری و سختی-نرمی شیمیایی مولکول است که معمولاً آن را با علامت HLG نمایش داده و برای محاسبه آن از رابطه (۴) استفاده می‌نمایند. در این معادله  $E_L$  و  $E_H$  به ترتیب انرژی اوربیتال‌های هومو و لومو هستند. گاف انرژی، ارتباط مستقیمی با میزان رسانایی الکتریکی مولکول‌ها دارد. ترکیباتی که گاف انرژی کوچکی دارند، راحت‌تر می‌تواند الکترون‌ها را از نوار ممنوعه عبور داده و به نوار رسانش منتقل نمایند. به همین دلیل موادی که گاف انرژی کمتری دارند، هدایت الکتریکی بیشتری نسبت به مولکول‌هایی با گاف انرژی بالاتر از خود نشان می‌دهند. نتایج ارائه شده در جدول (۵) به وضوح نشان می‌دهند که میزان گاف انرژی پس از جذب، افزایش یافته است. در واقع، میزان هدایت و رسانایی مفردون بعد از جذب کاهش چشمگیری یافته است. پارامتر بررسی شده بعدی، سختی شیمیایی ( $\eta$ ) است که مقدار آن را می‌توان با استفاده از معادله شماره (۵) به دست آورد. سختی شیمیایی، معیار خوبی برای برآورد میزان واکنش‌پذیری یک ترکیب جدید می‌باشد. زیرا مولکول‌هایی که از نظر ساختاری نرم‌تر هستند و میزان سختی شیمیایی آنها ناچیز است، راحت‌تر می‌توانند دانسته الکترونی خود را تغییر دهند. در نتیجه، انتقالات الکترونی که برای انجام واکنش‌های شیمیایی ضروری می‌باشد، در ترکیبات نرم‌تر و آسان‌تر صورت می‌گیرد. داده‌های موجود در جدول بیانگر آن است که میزان سختی پس از جذب مفردون کاسته شده است، مقدار پتانسیل شیمیایی ( $\mu$ ) هم که برای به دست آوردن بقیه پارامترها مورد استفاده قرار می‌گیرد، با استفاده از رابطه (۶) محاسبه گردید. الکتروفیلیسیته ( $\omega$ ) و بیشترین بار منتقل شده به سیستم ( $\Delta N_{max}$ ) هر دو کمیت‌های مناسبی هستند که میزان تمایل یک ترکیب را به جذب الکترون نشان می‌دهند. این دو پارامتر به ترتیب با استفاده از روابط (۷) و (۸) محاسبه شدند. هنگامی که دو مولکول با یکدیگر وارد واکنش می‌شوند، یکی از آنها به عنوان الکتروفیل عمل می‌کند در حالی که دیگری، نقش یک نوکلئوفیل را ایفا می‌نماید و ترکیبی که میزان الکتروفیلیسیته و ظرفیت بار آن بیشتر باشد، تمایل خواهد داشت تا به عنوان یک الکترون‌گیرنده رفتار کند. از سوی دیگر مولکولی که میزان الکتروفیلیسیته و ظرفیت بار آن کم باشد، تمایل دارد که از سیستم الکترون‌پذیرد. همانطور که از نتایج ارائه شده در جدول مشخص است، الکتروفیلیسیته مفردون پس از جذب سطحی نانو اکسید قلع کم شده است. در نتیجه می‌توان نتیجه گرفت که تمایل مفردون به جذب الکترون کاهش یافته است. ممان دوقطبی ساختارهای مورد بررسی نیز مورد مطالعه قرار گرفت. این پارامتر، معیار خوبی برای ارزیابی حلالیت مولکول‌ها در حلال‌های قطبی می‌باشد. مولکول‌هایی که ممان دو قطبی بالاتری دارند، حلالیت بهتری در آب خواهند داشت و ترکیباتی که از ممان دو قطبی کمتری برخوردار هستند، حلالیتشان در حلال‌های قطبی ضعیف‌تر خواهد بود.

همانطور که می‌توان مشاهده نمود، ممان دو قطبی مفدرون پس از جذب کاهش می‌یابد. لذا، مشتقات نانواکسید قلع با مفدرون در مقایسه با داروی مفدرون خالص و بدون استخلاف حلالیت کمتری در آب خواهند داشت.

$$HLG = E_L - E_H \quad (۴)$$

$$\eta = (E_L - E_H)/2 \quad (۵)$$

$$\mu = (E_L + E_H)/2 \quad (۶)$$

$$\omega = \mu^2/2\eta \quad (۷)$$

$$\Delta N_{\max} = -\mu/\eta \quad (۸)$$

جدول ۶. مقادیر انرژی‌های اوربیتال‌های هومو و لومو، گاف انرژی، سختی شیمیایی، پتانسیل شیمیایی، الکتروفیلیسته، بیشترین بار منتقل شده به سیستم و ممان دو قطبی برای مفدرون و مشتقات آنها با نانواکسید قلع

	$E_H$ (eV)	$E_L$ (eV)	HLG (eV)	$\eta$ (eV)	$\mu$ (eV)	$\omega$ (eV)	$\Delta N_{\max}$ (eV)	Dipole moment (debye)
Mephedrone	-5.41	5.44	10.85	5.425	0.015	0.00207	-0.00276	3.17
A-Isomer	-2.45	4.84	7.29	3.645	1.195	0.19588	-0.32784	2.94
B-Isomer	-0.12	4.66	4.78	2.39	2.27	1.07801	-0.94979	3.49
C-Isomer	-2.45	4.84	7.29	3.645	1.195	0.19588	-0.32784	9.044
D-Isomer	-2.45	4.84	7.29	3.645	1.195	0.19588	-0.32784	2.94

#### ۴. نتیجه گیری

پارامترهای ترمودینامیکی به دست آمده نشان داد که جذب سطحی داروی مفدرون با نانواکسید قلع گرمازا، خودبخودی، یک طرفه و غیر تعادلی می‌باشد و این واکنش بالاترین راندمان را در دمای اتاق دارد. آنالیز اوربیتال‌های مولکولی نیز ثابت کردند که مشتقات نانواکسید قلع نسبت به مفدرون خالص از الکتروفیلیسته، رسانایی و واکنش پذیری کمتری برخوردار هستند. با توجه به این که مطالعات تئوری نشان دادند که جذب سطحی نانواکسید قلع با داروی مفدرون از لحاظ تجربی امکان پذیر بوده، بررسی تجربی سنتز این مشتقات توسط متخصصان توصیه می‌شود.

#### ۵. مراجع

[1] Bagheri-Mohagheghi, M.M. and Shokoo-Saremi, M., Electrical, optical and structural properties of Li-doped SnO<sub>2</sub> transparent conducting films deposited by the spray pyrolysis technique: a carrier-type conversion study. *Semiconductor science and technology*, 19(6) (2004) 764.



- [2] Alinejad, M.R., Ghanaatshoar, M., Tehranchi, M.M., Mohagheghi, M.B. and Mohseni, S.M., 2005. Magneto-optical Faraday effect in Cobalt-doped SnO<sub>2</sub> transparent semiconducting films prepared by spray pyrolysis technique. In Proceedings of the Third Moscow International Symposium on Magnetism.
- [3] Reddy, N.K. and Reddy, K.R., Optical behaviour of sprayed tin sulphide thin films. *Materials research bulletin*, 41(2) (2006) 414-422.
- [4] Lim, C.T., Synthesis, optical properties, and chemical–biological sensing applications of one-dimensional inorganic semiconductor nanowires. *Progress in materials science*, 58(5) (2013) 705-748.
- [5] Zeng, W., Miao, B., Zhou, Q. and Lin, L., Hydrothermal synthesis and gas sensing properties of variety low dimensional nanostructures of SnO<sub>2</sub>. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 47 (2013) 116-121.
- [6] Hariharan, P.C., Koski, W.S., Kaufman, J.J., Miller, R.S. and Lowrey, A.H., Ab Initio MODPOT/VRDDO/MERGE calculations on energetic compounds. II. Nitroexplosives: RDX and  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\delta$ -HMX. *International Journal of Quantum Chemistry*, 22(S16) (1982) 363-375.
- [7] Harvey, S.D., Fellows, R.J., Campbell, J.A. and Cataldo, D.A., Determination of the explosive 2, 4, 6-trinitrophenylmethyl nitramine (tetryl) and its transformation products in soil. *Journal of Chromatography A*, 605(2) (1992) 227-240.
- [8] Lindstrom, I.E., Planar shock initiation of porous tetryl. *Journal of Applied Physics*, 41(1) (1970) 337-350.
- [9] Mustafa, A. and Zahran, A.A., Tetryl, Pentyl, Hexyl, and Nonyl. Preparation and Explosive Properties. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 8(1) (1963) 135-150.
- [10] Myers, S.R. and Spinnato, J.A., Metabolism, tissue distribution, and pharmacokinetics of N-methyl-N-2, 4, 6-tetranitroaniline (tetryl). *Environmental Toxicology and Pharmacology*, 24(3) (2007) 206-211.
- [11] Adamska, M. and Narkiewicz, U., Fluorination of carbon nanotubes— a review. *Journal of Fluorine Chemistry*, 200 (2017) 179-189.
- [12] Gu, Q. and Chen, J., Carbon-nanotube-based nano-emitters: A review. *Journal of Luminescence*, 200 (2018) 181-188.
- [13] Pal, G. and Kumar, S., Modeling of carbon nanotubes and carbon nanotube–polymer composites. *Progress in Aerospace Sciences*, 80 (2016) 33-58.
- [14] Bussy, C., Methven, L. and Kostarelos, K., Hemotoxicity of carbon nanotubes. *Advanced drug delivery reviews*, 65(15) (2013) 2127-2134.
- [15] Sheikhpour, M., Golbabaie, A. and Kasaeian, A., Carbon nanotubes: a review of novel strategies for cancer diagnosis and treatment. *Materials Science and Engineering: C*, 76 (2017) 1289-1304.
- [16] Sehrawat, P., Julien, C. and Islam, S.S., Carbon nanotubes in Li-ion batteries: A review. *Materials Science and Engineering: B*, 213 (2016) 12-40.

- [17] Sun, L., Wang, X., Wang, Y. and Zhang, Q., Roles of carbon nanotubes in novel energy storage devices. *Carbon*, 122 (2017) 462-474.
- [18] Yadav, S.P. and Singh, S., Carbon nanotube dispersion in nematic liquid crystals: An overview. *Progress in Materials Science*, 80 (2016) 38-76.
- [19] Ahmadi, R. and Jalali Sarvestani, M. R., Computational investigation of the influence of carbon nanostructures on the properties of energetic TATB substance by DFT method. *International Journal Bio-Inorganic Hybrid Nanomaterials*, 6 (2017) 239-244.
- [20] Jalali Sarvestani, M.R., Investigating the Effect of Doping Graphene with Silicon in the Adsorption of Alanine by Density Functional Theory. *Physical Chemistry Research*, 6(3) (2018) 639-655.
- [21] Jalali Sarvestani, M.R. and Ahmadi, R., Determination of Mn<sup>2+</sup> in Pharmaceutical Supplements by a Novel Coated Graphite Electrode Based on Zolpidem as a Neutral Ion Carrier. *Analytical and Bioanalytical Chemistry Research*, 5(2) (2018) 273-284.
- [22] Jalali Sarvestani, M.R. and Ahmadi, R., Investigating the Complexation of a recently synthesized phenothiazine with Different Metals by Density Functional Theory. *International Journal of New Chemistry*, 4(4) (2017) 101-110.
- [23] Sharifi, A., Hajiaghababaei, L., Suzangarzadeh, S. and Jalali, S.M.R., 2017. Synthesis of 3-((6-methyl-5-oxo-3-thioxo-2, 5-dihydro-1, 2, 4-triazin-4 (3H)-yl) imino) indolin-2-one as an Excellent Ionophore to the Construction of a Potentiometric Membrane Sensor for Rapid Determination of Zinc.
- [24] Sarvestani, M.R.J. and Ahmadi, R., Evaluating the Performance of 2, 3-dihydro-1H-phenothiazine-4 (5aH)-one as an Ionophore in Construction of a Cation Selective Electrode by Density Functional Theory. *Int. J. New. Chem*, 5 (2018) 409-418.
- [25] Jalali Sarvestani, M.R. and Ahmadi, R., Investigating the Effect of Fullerene (C<sub>20</sub>) Substitution on the Structural and Energetic Properties of Tetryl by Density Functional Theory. *Journal of Physical & Theoretical Chemistry*, 15(1) (2018) 15-25.
- [26] Ahmadi, R., Jalali Sarvestani, M.R. and Sadeghi, B., Computational study of the fullerene effects on the properties of 16 different drugs: A review. *International Journal of Nano Dimension*, 9(4) (2018) 325-335.
- [27] JALALI, S.M.R., Hajiaghababaei, L., Najafpour, J. and Suzangarzadeh, S., 2018. 1-(6-choloroquinoxaline-2-yl) Hydrazine as an Excellent Ionophore for Ppreparation of a Cobalt Selective Electrode and Potentiometric Measuring of Vitamin B12 in Pharmaceutical Samples.
- [28] Schnelle, W., Fischer, R. and Gmelin, E., Specific heat capacity and thermal conductivity of NdGaO<sub>3</sub> and LaAlO<sub>3</sub> single crystals at low temperatures. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 34(6) (2001) 846.
- [29] Ahmadi, R. and Jalali Sarvestani, M.R., Adsorption of proline amino acid on the surface of fullerene (C<sub>20</sub>) and boron nitride cage (B<sub>12</sub>N<sub>12</sub>): A comprehensive DFT study. *Quarterly Journal of Iranian Chemical Communication*, 7(3, pp. 242-351, Serial No. 24) (2019) 344-351.

- [30] Vafaei-Nezhad, M., Ghiasi, R. and Shafiei, F., Conformational Analysis of 2-halo-1, 3, 2-dioxaphosphinanes: A Density Functional Theory (DFT) Investigation. *Chemical Methodologies*, 4(2. pp. 115-219) (2020) 161-171.
- [31] Ghiasi, R. and Aghazadeh Kozehe Kanani, F., Theoretical insights of the electronic structures, conductivity, and aromaticity of graphyne and Si-doped graphynes. *Asian Journal of Nanosciences and Materials*, 1(4. pp. 172-293) (2018) 234-243.
- [32] Ghiasi, R. and Heidarbeigi, A., 2015. Applying Density Functional Theory to Study NLO Properties of Benzene-Based Chromophores.
- [33] Cortés-Arriagada, D., Villegas-Escobar, N. and Ortega, D.E., Fe-doped graphene nanosheet as an adsorption platform of harmful gas molecules (CO, CO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>S), and the co-adsorption in O<sub>2</sub> environments. *Applied Surface Science*, 427 (2018) 227-236.
- [35] Frisch, M.J.E.A., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., Robb, M.A., Cheeseman, J.R., Scalmani, G., Barone, V., Mennucci, B., Petersson, G. and Nakatsuji, H., 2009. gaussian 09, Revision d. 01, Gaussian. Inc., Wallingford CT, 201.
- [36] Carter, R., Suyetin, M., Lister, S., Dyson, M.A., Trehwhitt, H., Goel, S., Liu, Z., Suenaga, K., Giusca, C., Kashtiban, R.J. and Hutchison, J.L., Band gap expansion, shear inversion phase change behaviour and low-voltage induced crystal oscillation in low-dimensional tin selenide crystals. *Dalton Transactions*, 43(20) (2014) 7391-7399.
- [37] Dennington, R., Keith, T.A. and Millam, J.M., 2016. GaussView, version 6.0. 16. Semichem Inc. Shawnee Mission KS.

## Computational study of the effect of tin oxide nanoparticles on the thermodynamic properties of Mephedrone

Roya Ahmadi<sup>\*</sup>, Ashraf Sadat Shah Velayatih, Shabnam Shashmani, Masoumeh Simin Ghad

Department of Chemistry, Yadegar-e-Imam Khomeini (RAH) Shahre-rey Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Submitted: 02 May 2019, Revised: 16 August 2019, Accepted: 04 September 2019

### Abstract

Mephedrone is a drug that increases the speed of communication between the brain and the body by affecting the neurotransmitters in the brain. Superficial absorption of tin oxide nanoparticles with this stimulant increases the performance of this drug. In this study, superficial absorption of tin oxide nanoparticles The methamphetamine stimulant in the aqueous phase of water was investigated by the continuous gas model (PCM) method using the Density Functional Theory (DFT) method. For this purpose, first, the structure of the drug Mephedrone stimulant and its derivatives with tin oxide nanoparticles and its effect on the nervous system with the level of calculations 6-316\* and hybrid functions of B3LYP were geometrically optimized. Then IR calculations, NBO studies, and molecular orbital calculations including the highest occupied molecular orbitals (HOMO) as well as the lowest unoccupied molecular orbitals (LUMO) and to investigate parameters such as hardness, softness, chemical Brilliance and analytical potential. They did. Also, the calculated thermodynamic parameters such as Gibbs free energy changes ( $\Delta G_f$ ), enthalpy formation changes ( $\Delta H_f$ ) showed that the surface absorption of Mephedrone with tin oxide is heat-generating, spontaneous, unilateral and unbalanced.

**Keywords:** Mephedrone, NBO, Density Function Theory, tin Nano Oxide, Surface Absorption.

---

<sup>\*</sup>Corresponding author : Roya Ahmadi

Address: Department of Chemistry, Yadegar-e-Imam Khomeini (RAH) Shahre-rey Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Tel: 09122976055

E-mail: i.j.new.chemistry@gmail.com