



دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر
فصلنامه‌ی کاربرد شیمی در محیط زیست

سال چهاردهم، شماره‌ی ۵۳
بهار ۱۴۰۲، صفحات ۷-۱

بررسی محاسباتی جذب سطحی لوموستین بر روی سطح نقاط کوانتومی گرافن

محمد رضا جلالی سروستانی

باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، واحد یادگار امام خمینی (ره) شهر ری، دانشگاه آزاد اسلامی، شهر ری، ایران

رویا احمدی*

گروه شیمی، واحد یادگار امام خمینی (ره) شهر ری، دانشگاه آزاد اسلامی، شهر ری، ایران

Email: Roya_Ahmadi_Chemist@yahoo.com

ارسال: ۱۴۰۱/۱۱/۲۱ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۳/۲۴ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۳/۳۰

چکیده

در این مطالعه، برهمکنش لوموستین با نقاط کوانتومی گرافن با استفاده از محاسبات مادون قرمز (IR) و اوربیتال‌های پیوندی طبیعی (NBO) و اوربیتال‌های مولکولی مرزی (هومو و لومو) مورد ارزیابی قرار گرفت. مقادیر منفی انرژی جذب سطحی، تغییرات آنتالپی و تغییرات انرژی آزاد گیبس حاکی از آن بود که جذب سطحی لوموستین بر روی سطح نقاط کوانتومی گرافن گرماده، خودبخودی و از لحاظ عملی امکان‌پذیر می‌باشد. پارامترهای ساختاری مانند انرژی اوربیتال‌های هومو و لومو، گپ انرژی، الکتروفیلیسته، پتانسیل شیمیایی، سختی شیمیایی، چگالی و انرژی نقطه صفر هم محاسبه شده و مورد بحث قرار گرفتند. کاهش چشم‌گیر گپ انرژی بعد از جذب شدن لوموستین بر روی سطح نقاط کوانتومی گرافن نشان داد که میزان واکنش‌پذیری دارو پس از جذب شدن بر روی سطح نانو ساختار بهبود چشم‌گیری یافته و کمپلکس‌های تشکیل شده میان لوموستین و نقاط کوانتومی گرافن ممکن است عملکرد بهتری به عنوان یک دارو ضد سرطان داشته باشند.

کلیدواژه: لوموستین، نقاط کوانتومی گرافن، نظریه تابعی چگالی، اوربیتال‌های پیوندی، جذب سطحی.

مقدمه

لوموستین یک داروی ضد سرطان است (آنتی نئوپلاستیک یا سیتوتوکسیک) که در شیمی درمانی مورد استفاده قرار می‌گیرد. لوموستین در گروهی از داروها موسوم به آلکیل‌کننده‌ها دسته‌بندی می‌شود. از لوموستین برای موارد زیر مورد استفاده قرار می‌گیرید درمان تومورهای مغزی، از جمله تومورهای اولیه مغز (تومورهایی که از داخل بافت مغز منشاء گرفته و رشد می‌کنند) و تومورهای متاستاتیک (تومورهایی که از سایر اندام‌ها به مغز گسترش می‌یابند) درمان لنفوم هاجکین و غیر هاجکین، درمان ملانوما، سرطان ریه و سرطان روده بزرگ استفاده می‌گردد [۵-۱]. از جمله عوارض جانبی این دارو می‌توان به مسمومیت ریوی، اختلال در عملکرد کبد و کلیه، تهوع، ناباروری، کبودی یا خونریزی آسان، ضعف غیر معمول تب، لرز، بدن درد، علائم آنفولانزا، درد معده، تب کم، ادرار تیره، مدفوع سفالی رنگ، یرقان (زردی پوست و چشم) از دست رفتن دوره‌های قاعدگی (دوره‌های پرئود نامنظم) توده‌های غیر معمول در بدن بشورات قرمز رنگ پوست، نبض سریع، درد، از دست دادن وزن. تنفس نفس و یا سرفه ای که متوقف نمی‌شود پوست زرد یا رنگ پریده، ادرار تیره رنگ، گیجی و ضعف. تهوع خفیف، استفراغ، اسهال زخم یا تکه‌های سفید داخل دهان و یا ریزش موقت مو خارش پوست خفیف، اشاره نمود [۱۰-۶]. از این رو، پیدا کردن یک نانو حامل برای رساندن داروی لوموستین به بافت سرطانی مورد نظر و کاهش عوارض جانبی آن، امری ضروری می‌باشد. از سوی دیگر نانو ساختارهای کربنی مانند نقاط کوانتومی گرافن، در سال‌های اخیر توانسته‌اند به دلیل ویژگی‌های ایده آل فیزیکی و شیمیایی که دارند، توجهات زیادی را در جامعه علمی بین‌المللی به سمت خود جلب نمایند [۱۵-۱۱]. گرافن یک نانو ساختار دو بعدی می‌باشد که در آن اتم‌های کربن با استفاده از پیوندهای دوگانه مزدوج به یکدیگر متصل شده‌اند، در واقع صفحات گرافن

از حلقه‌هایی شش ضلعی متعدد مشابه حلقه بنزن که به یکدیگر وصل هستند، تشکیل شده است. گرافن برای نخستین بار در سال ۱۹۸۶ میلادی سنتز شد و نام آن از ترکیب اسم گرافیت و پسوند (ان) که به هیدروکربن‌های آروماتیک چندحلقه‌ای اشاره دارد، به وجود آمده است. با توجه به اینکه، گرافن مساحت سطح ویژه بالا و خواص ساختاری و الکتریکی بسیار خوبی دارد تاکنون عملکرد آن به عنوان جاذب، نانو حامل دارویی و همچنین ماده حس کننده برای حذف آلاینده‌ها، دارو رسانی و همچنین اندازه‌گیری بسیاری از مواد شیمیایی از جمله اسید آمینه پرولین، نیتروژن دیاکسید، سولفید هیدروژن، فرمالدهید، داروی سانی‌تیب و غیره مورد مطالعه قرار گرفته است. از این رو، هدف این تحقیق بررسی جذب سطحی داروی لوموستین بر روی سطح نقاط کوانتومی گرافن برای نخستین بار، به روش تئوری تابعی چگالی می‌باشد [۲۰-۱۵].

مواد و روش‌ها

ابتدا ساختارهای لوموستین و نقاط کوانتومی گرافن و کمپلکس‌های آن‌ها در ۳ موقعیت متفاوت با استفاده از نرم افزارهای 1.3.0.3 nanotube modeller و Spartan رسم گردید [۲۰-۱۹]. سپس محاسبات بهینه سازی هندسی، مادون قرمز (IR) و اوربیتال‌های طبیعی پیوندی (NBO) و اوربیتال‌های مولکولی مرزی (FMO) بر روی تمامی ساختارها با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی و سری پایه B3LYP/6-31G(d) به وسیله نرم افزار اسپارتان صورت گرفت [۱۵-۱۳]. تمامی محاسبات در فشار یک اتمسفر، محیط آبی و در گستره دمایی ۲۹۸ الی ۳۹۸ کلوین در فواصل دمایی ۱۰-۱۰۰ انجام شد. لازم به ذکر است که روش و سری پایه مذکور به این دلیل انتخاب گردید که در مطالعات پیشین مربوط به نانو ساختارها، نتایج حاصل از این روش تطابق و هماهنگی قابل قبولی با داده‌های تجربی داشت [۱۸-۱۶].

فرآیند مورد بررسی به شرح زیر است:

$$\mu = (E_{LUMO} + E_{HOMO})/2 \quad (9)$$

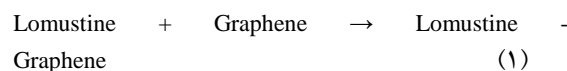
$$\omega = \mu^2/2\eta \quad (10)$$

$$\Delta N_{max} = -\mu/\eta \quad (11)$$

در روابط ذکر شده در بالا، E_{LUMO} ، E_{HOMO} ، E_{g1} و E_{g2} به ترتیب انرژی پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده، انرژی بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده، گاف انرژی جاذب و گاف انرژی کمپلکس، می باشند [۱۵].

بحث و نتایج

- آنالیز NBO، اوربیتال های جبهه و خواص ساختاری همانطور که در ساختارهای بهینه ارائه شده در شکل ۱ کاملاً مشخص است، به منظور پیدا کردن پایدارترین پیکربندی، برهمکنش لوموستین با نقاط کوانتومی گرافن در سه حالت متفاوت مورد بررسی قرار گرفت. در I-Isomer، لوموستین از سمت گروه کربونیل خود در مجاورت گرافن قرار گرفته است و در پیکربندی II-Isomer، لوموستین از سمت اتم نیتروژن اتصال دهنده بین حلقه و گروه کربونیل می باشد در نزدیکی گرافن قرار گرفته است. در پیکربندی III-Isomer، دارو از سمت گروه استامید خود به گرافن نزدیک شده است. همانطور که مقادیر انرژی جذب سطحی ارائه شده در جدول ۱، نشان می دهد که برهمکنش لوموستین با نقاط کوانتومی گرافن در هر سه پیکربندی بررسی شده از لحاظ تجربی امکان پذیرتر است. نتایج حاصل از محاسبات NBO، نشان داد که در هر سه پیکربندی هیچ گونه پیوندی میان لوموستین و جاذب تشکیل نشده است و جذب در هر سه موقعیت، از نوع فیزیکی است [۱۶-۱۲]. محاسبات IR نیز بر روی ساختارهای بهینه شده نیز صورت گرفت و مقادیر کمترین فرکانس به دست آمده در جدول ۱، ارائه شده اند همانطور که مقادیر ارائه شده نشان می دهند هیچ گونه مقادیر منفی به دست نیامده است که نشان می دهد تمامی ساختارهای مطالعه شده در یک حالت کمینه موضعی قرار دارند. مقدار ممان دوقطبی برای لوموستین و کمپلکس های آن با نقاط کوانتومی



پس از اتمام محاسبات، از معادلات ۲ الی ۶ برای محاسبه مقادیر انرژی جذب سطحی (E_{ad})، تغییرات آنتالپی جذب سطحی (ΔH_{ad})، تغییرات انرژی آزاد گیبس (ΔG_{ad})، تغییرات آنتروپی (ΔS_{ad}) و ثابت تعادل ترمودینامیکی K_{th} استفاده گردید [۱۳].

$$E_{ad} = (E_{\text{Lomustine-Graphene}} - (E_{\text{Lomustine}} + E_{\text{Graphene}})) \quad (2)$$

$$\Delta H_{ad} = (H_{\text{Lomustine-Graphene}} - (H_{\text{Lomustine}} + H_{\text{Graphene}})) \quad (3)$$

$$\Delta G_{ad} = (G_{\text{Lomustine-Graphene}} - (G_{\text{Lomustine}} + G_{\text{Graphene}})) \quad (4)$$

$$\Delta S_{ad} = (S_{\text{Lomustine-Graphene}} - (S_{\text{Lomustine}} + S_{\text{Graphene}})) \quad (5)$$

$$K_{th} = \exp(-\frac{\Delta G_{ad}}{RT}) \quad (6)$$

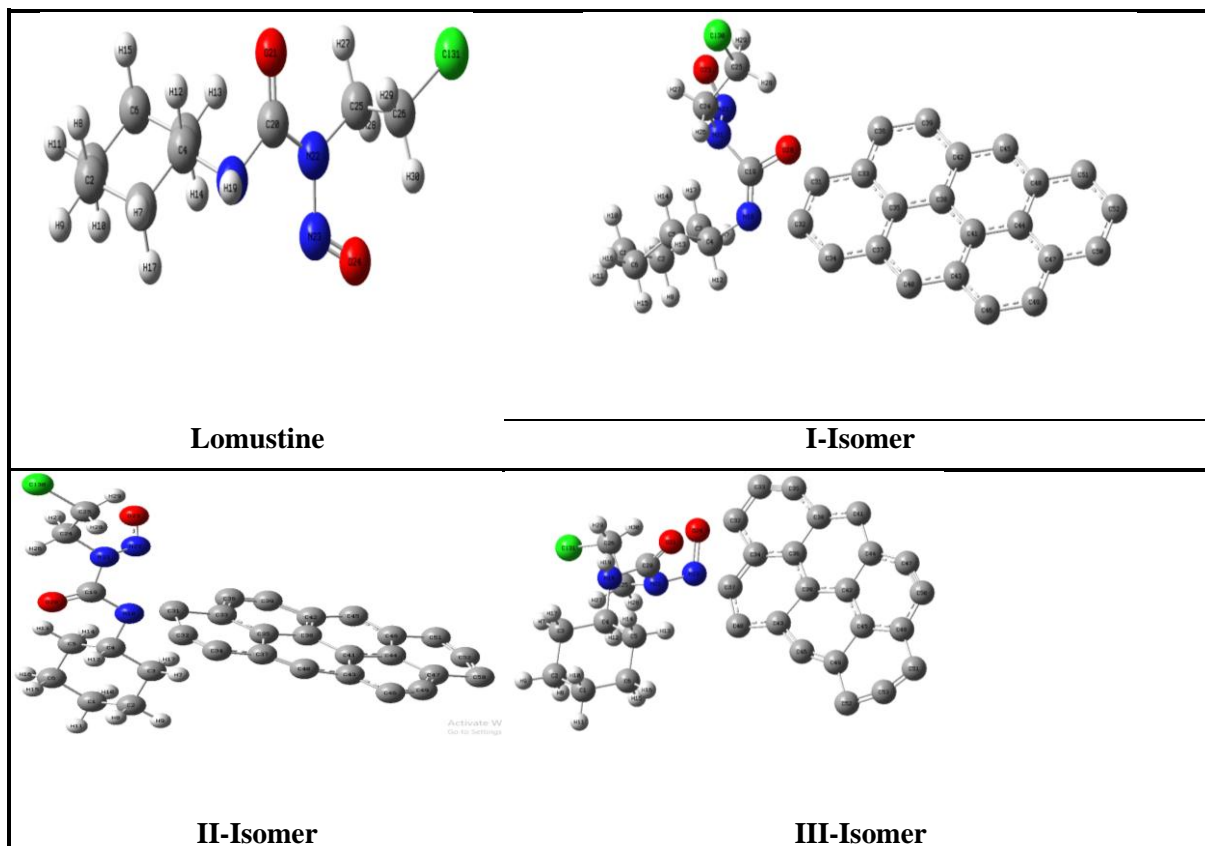
در روابط ذکر شده، E نماد انرژی کل الکترونی برای هر یک از ساختارها، H نماد مجموع انرژی کل الکترونی و آنتالپی تصحیح حرارتی، G نماد مجموع انرژی کل الکترونی و انرژی آزاد گیبس، R ثابت تعادل گازها و T دما بر حسب کلون، می باشند. پارامترهای مرتبط با اوربیتال های مولکولی نیز از جمله گاف انرژی E_g ، درصد کاهش گاف انرژی (ΔE_g)، سختی شیمیایی (η)، پتانسیل شیمیایی (μ)، الکتروفیلیته (ω) و بیش ترین بار انتقال یافته (ΔN_{max}) نیز با استفاده از روابط ۷ الی ۱۱ محاسبه شدند.

$$HLG = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad (7)$$

$$\eta = (E_{LUMO} - E_{HOMO})/2 \quad (8)$$

روی نانوساختار افزایش یافته است که نشان می‌دهد مشتقات دارو و نانو ساختار حلالیت بیش‌تری در آب در مقایسه با لوموستین خالص دارند [۱۳].

گرافن محاسبه و بررسی گردید و نتایج حاصل در جدول ۲، ارائه شده است. همانطور که مشخص است، در هر سه پیکربندی مقدار ممان دو قطبی دارو بعد از جذب شدن بر



شکل ۱: ساختار بهینه شده لوموستین و کمپلکس‌های آن با نقاط کوانتومی گرافن در سه پیکربندی مختلف

جدول ۱- خواص شیمیایی محاسبه شده برای لوموستین و مشتقاتش با نقاط کوانتومی گرافن

	Lomustine	I-Isomer	II-Isomer	III-Isomer
E_{ad} (kJ/mol)	---	-۱۳۹۱/۸۸	-۱۳۱۸/۰۴	-۱۶۱۲/۳۷
کمترین فرکانس (cm^{-1})	۲۵/۶۹	۸/۸۲	۱۷/۰۱	۱۲/۶۹
طول پیوند	---	۱/۳۹	۱/۴۸	۱/۴۳
انرژی نقطه صفر (kJ/mol)	۸۰۱/۶۲	۱۱۴۶/۲۰	۱۱۴۵/۲۷	۱۱۵۱/۱۵

جذب شدن آن بر سطح نانوساختار در هر سه ایزومر، کاهش یافته است که این موضوع نشان دهنده این است که ایزومرها دارای واکنش پذیری بیش تر در مقایسه با لوموستین خالص هستند. زیرا، ترکیباتی که نرم تر هستند انرژی کمتری لازم دارند تا انتقالات الکترونی مورد نیاز برای انجام واکنش های شیمیایی را انجام دهند [۱۶]. مقدار پتانسیل شیمیایی برای تمامی ساختارها منفی می باشد که نشان می دهد فرآیند جذب از نظر ترمودینامیکی پایدار است. الکتروفیلیسته و بیشترین بار انتقال یافته، هر دو پارامترهایی هستند که میزان تمایل یک مولکول به جذب الکترون را نشان می دهند، همانطور که در مقادیر ارائه شده در جدول ۱ نشان می دهند مقدار هر دو پارامتر بعد از جذب شدن دارو بر روی سطح نانو ساختار افزایش فراوانی یافته است که نشان می دهد مشتقات دارو و نانو ساختار تمایل بیشتری به جذب الکترون دارند [۱۵].

برخی از پارامترهای مرتبط به اوربیتال های هومو و لومو و ویژگی های ساختاری مانند گاف انرژی، سختی شیمیایی، الکتروفیلیسته، پتانسیل شیمیایی و بیش ترین بار انتقال یافته هم محاسبه شدند و نتایج به دست آمده در جدول ۲، ارائه گردید. همان گونه که ملاحظه می شود مقدار گاف انرژی دارو پس از تعامل با نانوساختار در هر سه ایزومر کاهش محسوسی یافته است. به عبارتی دیگر، میزان هدایت الکتریکی و خاصیت الکتروکاتالیتیک دارو بعد از جذب شدن بر روی جاذب قوی تر شده است زیرا گاف انرژی ارتباطی معکوس با رسانایی دارد. یعنی هر چه ترکیبی دارای گاف انرژی کمتری باشد، میزان رسانایی آن هم بیش تر خواهد بود. پارامتر بعدی که مورد مطالعه قرار گرفت، سختی شیمیایی بود. همانطور که داده های ارائه شده در جدول ۱ به وضوح نشان می دهند، میزان سختی شیمیایی لوموستین بعد از

جدول ۲- پارامترهای محاسبه شده مرتبط با اوربیتال های جبهه و ممان دوقطبی برای لوموستین و مشتقاتش با نقاط کوانتومی گرافن

	E_H (eV)	E_L (eV)	HLG (eV)	η (eV)	μ (eV)	ω (eV)	ΔN_{max} (eV)	ممان دوقطبی (دبای)
Lomustine	-8.460	5.530	13.530	5.765	-4.235	-5.684	0.987	3.480
I-Isomer	-4.560	2.040	6.600	3.300	-1.260	-4.321	0.382	5.890
II-Isomer	-5.690	0.760	6.450	3.225	-2.465	-2.110	0.764	11.380
III-Isomer	-5.620	0.760	6.380	3.190	-2.430	-2.094	0.762	8.360

که مشخص است برهمکنش لوموستین با نقاط کوانتومی گرافن خودبخودی است، زیرا مقدار ΔG_{ad} برای هر سه پیکربندی به شدت منفی و بزرگ می باشد. تاثیر دما بر روی هر دو پارامتر بررسی شد و همانطور که مشخص است با افزایش دما مقدار تغییرات انرژی آزاد گیبس مثبت تر شده است. در واقع، با افزایش دما میزان خودبخودی بودن و برگشت ناپذیری فرآیند کاهش یافته است. در نتیجه، دمای بهینه برای جذب سطحی لوموستین بر روی سطح نقاط کوانتومی گرافن دمای اتاق است و در این دما فرآیند جذب بالاترین راندمان را دارد [۱۸-۱۳]. مقادیر تغییرات آنتروپی و همچنین ثابت تعادل ترمودینامیکی نیز در جدول ۴، ارائه

پارامترهای ترمودینامیکی - مقادیر تغییرات آنتالپی جذب سطحی و تغییرات انرژی آزاد گیبس محاسبه شده در جدول ۳، ارائه شده اند. همانطور که ملاحظه می شود مقدار ΔH_{ad} برای هر سه ایزومر به شدت منفی است که نشان می دهد فرآیند جذب سطحی در هر دو حالت گرمازا است. تاثیر دما بر روی این پارامتر بررسی گردید و همانطور که مشخص است تغییر معناداری در مقدار ΔH_{ad} با افزایش دمای محیط به وجود نیامده است. در نتیجه، بر اساس این پارامتر نمی توان دمای بهینه برای برهمکنش لوموستین با نانوساختار را مشخص نمود. مقادیر تغییرات انرژی آزاد گیبس، نیز در جدول ۲، ارائه گردید. همانطور

شده است. مقادیر بزرگ ثابت تعادل ترمودینامیکی نشان می‌دهد که برهمکنش دارو و نانوجاذب برگشت ناپذیر، یک طرفه و غیرر تعادلی است. مقادیر مثبت تغییرات آنتروپی نیز نشان دهنده آن است که میزان بی نظمی در حین فرآیند جذب سطحی دارو بر روی سطح نقاط کوانتومی گرافن افزایش یافته است.

جدول ۳- مقادیر تغییرات انرژی آزاد گیبس و تغییرات آنتالپی در گستره دمایی ۲۹۸ الی ۳۹۸ کلوین

Temperature(K)	$\Delta G_{ad}(KJ/mol)$			$\Delta H_{ad}(KJ/mol)$		
	I-Isomer	II-Isomer	III-Isomer	I-Isomer	II-Isomer	III-Isomer
278.15	-1377.886	-1304.314	-1595.207	-1303.535	-1230.993	-1516.892
281.15	-1377.540	-1303.967	-1594.880	-1303.535	-1231.036	-1516.882
284.15	-1377.191	-1303.609	-1594.546	-1303.542	-1231.057	-1516.876
287.15	-1376.835	-1303.242	-1594.209	-1303.550	-1231.077	-1516.876
290.15	-1376.471	-1302.869	-1593.866	-1303.562	-1231.101	-1516.881
293.15	-1376.108	-1302.491	-1593.516	-1303.584	-1231.130	-1516.889
296.15	-1375.743	-1302.116	-1593.164	-1303.634	-1231.168	-1516.925
299.15	-1375.373	-1301.736	-1592.812	-1303.690	-1231.214	-1516.975
302.15	-1374.997	-1301.352	-1592.456	-1303.751	-1231.264	-1517.013
305.15	-1374.621	-1300.961	-1592.093	-1303.821	-1231.317	-1517.048

جدول ۴- مقادیر تغییرات آنتروپی و ثابت تعادل ترمودینامیکی در گستره دمایی ۲۹۸ الی ۳۹۸ کلوین

Temperature(K)	K_{th}			$\Delta S_{ad}(J/mol)$		
	I-Isomer	II-Isomer	III-Isomer	I-Isomer	II-Isomer	III-Isomer
278.15	$6.364 \times 10^{+24}$	$1.514 \times 10^{+21}$	$7.447 \times 10^{+24}$	413.878	417.486	403.002
281.15	$1.554 \times 10^{+22}$	$5.267 \times 10^{+28}$	$6.769 \times 10^{+21}$	417.665	421.228	406.858
284.15	$4.323 \times 10^{+29}$	$2.044 \times 10^{+26}$	$7.142 \times 10^{+28}$	421.446	424.964	410.710
287.15	$1.360 \times 10^{+27}$	$8.907 \times 10^{+23}$	$8.720 \times 10^{+25}$	425.220	428.692	414.556
290.15	$4.830 \times 10^{+24}$	$4.351 \times 10^{+21}$	$1.225 \times 10^{+23}$	428.987	432.414	418.396
293.15	$1.933 \times 10^{+22}$	$2.374 \times 10^{+29}$	$1.972 \times 10^{+20}$	432.747	436.129	422.231
296.15	$8.747 \times 10^{+29}$	$1.445 \times 10^{+27}$	$3.659 \times 10^{+27}$	436.500	439.837	426.060
299.15	$4.424 \times 10^{+27}$	$9.779 \times 10^{+24}$	$7.741 \times 10^{+24}$	440.246	443.537	429.882
302.15	$2.489 \times 10^{+25}$	$7.316 \times 10^{+22}$	$1.842 \times 10^{+22}$	443.984	447.231	433.698
305.15	$1.556 \times 10^{+23}$	$6.035 \times 10^{+20}$	$4.931 \times 10^{+29}$	447.715	450.917	437.508

- [7] Ravi, P., Gore, G. M., Tewari, S. P., Sikder, A. K., 2012, DFT study on the structure and explosive properties of nitropyrazoles. *Molecular Simulation*, 38, 218-226.
- [8] Cooper, J. K., Grant, C. D., Zhang, J. Z., 2013, Experimental and TD-DFT Study of Optical Absorption of Six Explosive Molecules: RDX, HMX, PETN, TNT, TATP, and HMTD. *Journal of Physical Chemistry A*, 117, 6043-6051.
- [9] Lin, H., Chen, J., Zhu, S., Li, H., Huang, Y., 2017, Synthesis, Characterization, Detonation Performance, and DFT Calculation of HMX/PNO Cocystal Explosive. *Journal of Energetic Materials*, 35, 95-108.
- [10] Jalali Sarvestani, M. R., Gholizadeh Arashti, M., Mohasseb, B., 2020, Quetiapine Adsorption on the Surface of Boron Nitride Nanocage (B12N12): A Computational Study. *International Journal of New Chemistry*, 7, 87-100.
- [11] Ahmadi, R., Jalali Sarvestani, M. R., 2019, Adsorption of proline amino acid on the surface of fullerene (C20) and boron nitride cage (B12N12): A comprehensive DFT study. *Iranian Chemical Communication*, 7 (2019) 344-351.
- [12] Ahmadi, R., Jalali Sarvestani, M. R., Sadeghi, B., 2018, Computational study of the fullerene effects on the properties of 16 different drugs: A review. *International Journal Nano Dimension*, 9, 325-335.
- [13] Ahmadi, R., Jalali Sarvestani, M. R., 2018, Investigating the Effect of Doping Graphene with Silicon in the Adsorption of Alanine by Density Functional Theory, *Physical Chemistry Research*, 6 (2018) 639-655.
- [14] Jalali Sarvestani, M. R., Ahmadi, R., 2018, Investigating the Effect of Fullerene (C20) Substitution on the Structural and Energetic Properties of Tetraol by Density Functional Theory. *Journal of Physical and Theoretical Chemistry*, 15, 15-25.
- [15] Baei, M. T., 2013, First-Principles Study of NO₂ Adsorption on C₂₀ Fullerene. *Heteroatom Chemistry*, 24, 516-523.
- [16] Jalali Sarvestani, M. R., Ahmadi, R., 2018, Determination of Mn₂₊ in Pharmaceutical Supplements by a Novel Coated Graphite Electrode Based on Zolpidem as a Neutral Ion Carrier. *Analytical and Bioanalytical Chemistry Research*, 5, 273-284.
- [17] Jalali Sarvestani, M. R., Ahmadi, R., 2020, Adsorption of Tetraol on the Surface of B12N12: A Comprehensive DFT Study. *Chemical Methodologies*, 4, 40-54.
- [18] Jalali Sarvestani, M. R., Boroushaki, T., Ezzati, M., 2018, The Effect of B12N12 Substitution on the Properties of TEX Energetic Materials in Different Temperature Conditions: A DFT Study. *International Journal of New Chemistry*, 5, 428-434.
- [19] Deppmeier, B. J., Driessen, A. J., Hehre, T. S., Hehre, W. J., Johnson, J. A., Klunzinger, P. E., Leonard, J. M., Pham, I. N., W. J. Pietro, J. Yu, Irvine, C. A., 2011, Spartan '10, Version 1.1.0, Wavefunction, Inc.
- [20] Nanotube Modeler J. Crystal. Soft., 2014, software.

نتیجه گیری

لوموستین یک داروی شیمی درمانی قوی و یک آلاینده بالقوه زیست محیطی است. در نتیجه، پیدا کردن روشی برای حمل هوشمند آن به بافت سرطانی هدف از اهمیت زیادی برخوردار است. به همین دلیل، در این تحقیق عملکرد نقاط کوانتومی گرافن به عنوان یک حسگر و نانو حامل برای شناسایی و حمل این دارو مورد مطالعه قرار گرفت. مقادیر انرژی جذب سطحی و پارامترهای ترمودینامیکی نشان دهنده آن بود که برهمکنش لوموستین با نقاط کوانتومی گرافن گرمازا، خودبخودی و از نظر تجربی امکان پذیر است. داده های حاصل از محاسبات NBO حاکی از آن بود که جذب از نوع فیزیکی بوده و میان لوموستینو نانو ساختار پیوند شیمیایی به وجود نیامده است. علاوه براین، کاهش گاف انرژی و در پی آن بهبود هدایت الکتریکی در حین این برهمکنش، نشان دهنده آن بود که از نقاط کوانتومی گرافن می توان برای توسعه حسگرهای نوین الکتروشیمیایی به منظور اندازه گیری لوموستین استفاده نمود.

منابع

- [1] Farahani, H., Rahimi-Nasrabadi, M., 2018, Trace Determination of Tetranitrocarbazole in Aquatic Environment Using Carbon Dot-Dispersive Liquid-Liquid Microextraction Followed by UV-Vis Spectrophotometry. *Iranian Journal of Analytical Chemistry*, 5, 17-24.
- [2] Rahimi-Nasrabadi, M., Zahedi, M. M., Pourmortazavi, S. M., Heydari, R., Rai, H., Jazayeri, J., Javidan, A., 2012, Simultaneous determination of carbazole-based explosives in environmental waters by dispersive liquid-liquid microextraction coupled to HPLC with UV-Vis detection. *Microchimia Acta*, 177, 145-152.
- [3] Heydari, R., 2013, simultaneous determination of carbazoles in water samples by cloud point extraction coupled to HPLC, *Journal of Applied Chemical Research*, 7, 21-31.
- [4] Kumari, S., Joshi, S., Cordova-Sintjago, T. C., Pant, D. D., Sakhuja, R., 2016, Highly sensitive fluorescent imidazolium-based sensors for nanomolar detection of explosive picric acid in aqueous medium. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 229, 599-608.
- [5] Ghosh, P., Roy, P., Ghosh, A., Jana, S., Murmu, N. C., Mukhopadhyay, S. K., Banerjee, P., 2017, Explosive and pollutant TNP detection by structurally flexible SOFs: DFT-D3, TD-DFT study and in vitro recognition. *Journal of Luminescence*, 185, 272-278.
- [6] Vovusha, H., Sanyal, B., 2015, DFT and TD-DFT studies on the electronic and optical properties of explosive molecules adsorbed on boron nitride and graphene nano flakes. *RSC Advances*, 5, 4599-4608.