



دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر  
فصلنامه‌ی کاربرد شیمی در محیط زیست

سال چهاردهم، شماره‌ی ۵۵  
پاییز ۱۴۰۲، صفحات ۴۰-۳۳

## بررسی محاسباتی جذب سطحی ماده انفجاری ۳-پیکریل آمینو-۱،۲،۴-تری آزول بر روی سطح نانومخروط کربنی

محمد رضا جلالی سروستانی

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

رویا احمدی\*

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

Email: Roya\_Ahmadi\_Chemist@yahoo.com

دریافت ۱۴۰۲/۰۶/۱۱ پذیرش ۱۴۰۲/۰۹/۱۶

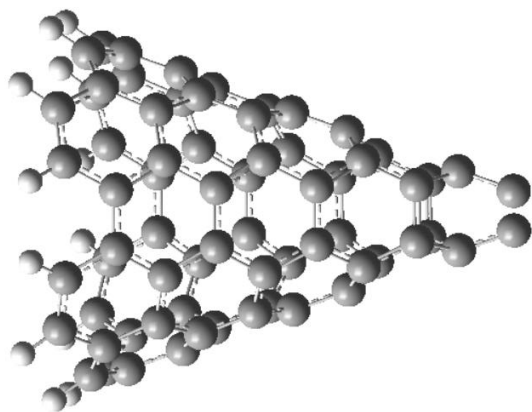
### چکیده

در این مطالعه، برهم کنش ماده انفجاری ۳-پیکریل آمینو-۱،۲،۴-تری آزول (PATO) 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 PATO بر روی سطح نانومخروط کربنی گرما ده، خودبخودی و از لحاظ عملی امکان پذیر می‌باشد. پارامترهای ساختاری مانند انرژی اوربیتال‌های هومو و لومو، گپ انرژی، الکتروفیلیسیت، پتانسیل شیمیایی، سختی شیمیایی، چگالی و انرژی نقطه صفر هم محاسبه شده و مورد بحث قرار گرفتند. کاهش چشم گیر گپ انرژی بعد از جذب شدن PATO بر روی سطح نانو مخروط کربنی نشان داد که میزان واکنش پذیری آن پس از جذب شدن بر روی سطح نانو ساختار بهبود چشم گیری یافته و کمپلکس‌های تشکیل شده میان PATO و نانو مخروط کربنی ممکن است عملکرد بهتری به عنوان یک ماده پیشرانه نوین داشته باشند.

**کلیدواژه:** مواد انفجاری، نانو مخروط کربنی، نظریه تابعی چگالی، اوربیتال‌های طبیعی پیوندی، جذب سطحی.

## مقدمه

هستند که این نانوساختار را به گزینه‌ای مناسب جهت توسعه حسگرهای جدید، جاذب‌های نوین جهت حذف آلاینده و همچنین سنتز نانوکامپوزیت‌هایی با خواص دلخواه، تبدیل می‌نمایند [۱۳-۱۸].



شکل ۲: ساختار ۳ بعدی نانومخروط کربنی

## مواد و روش‌ها

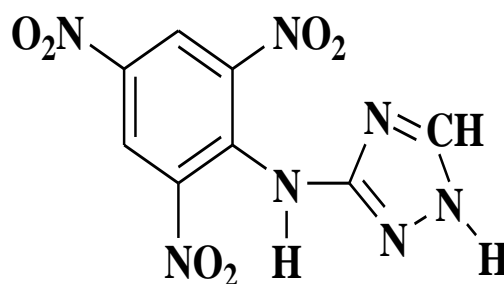
ابتدا ساختارهای PATO و نانومخروط کربنی و کمپلکس-های آن‌ها در ۲ موقعیت متفاوت با استفاده از نرم‌افزارهای nanotube modeller 1.3.0.3 و Spartan رسم گردید [۱۹-۲۰].

سپس محاسبات بهینه‌سازی 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 نرم‌افزار اسپارتان صورت گرفت [۱۳-۱۵]. تمامی محاسبات در فشار یک اتمسفر، محیط آبی و در گستره دمایی ۲۹۸ الی ۳۹۸ کلوین در فواصل دمایی ۱۰°-۱۰° انجام شد.

لازم به ذکر است که روش و سری پایه مذکور به این دلیل انتخاب گردید که در مطالعات پیشین مربوط به نانوساختارها، نتایج حاصل از این روش تطابق و هماهنگی قابل قبولی با داده‌های تجربی داشت [۱۶-۱۸].

ماده ۳-پیکریل آمینو-۱،۲،۴-تری آزول (PATO)، که ساختار آن در شکل یک آمده است یک ماده انفجاری نیتروآروماتیک است که در ساخت سلاح‌های جنگی به وفور مورد استفاده قرار می‌گیرد و برای محیط زیست و سلامتی انسان و سایر موجودات زنده اثرات سوء بسیار زیادی می‌گذارد که از مهم‌ترین آن‌ها می‌توان به سرطان‌زا بودن و ایجاد جهش‌های ژنی اشاره نمود و از سوی دیگر، این مواد حساسیت زیادی نسبت به دما و شوک دارند که می‌تواند منجر به وقوع انفجار یا آتش سوزی درمواقع نامناسب و ایجاد خسارات جانی و مالی گردند.

از این رو، حذف و اندازه‌گیری آن در نمونه‌های زیست محیطی و همچنین سنتز کامپوزیت‌های جدید از PATO که خواص انفجاری مشابه و یا قوی‌تری نسبت به آن داشته و در عین حال حساسیت آن نسبت به حرارت و شوک، کاهش یافته است از اهمیت زیادی برخوردار است [۱-۵].



شکل ۱: ساختار شیمیایی PATO

از سوی دیگر نانومخروط کربنی (شکل ۲-۲) حد واسطی کیفی شکل میان صفحات گرافن و نانولوله‌های کربنی می‌باشد [۶-۱۲]. این نانوساختار را می‌توان با برش ۱ تا ۵ بخش با زاویه ۶۰ درجه از ورقه گرافن که لبه‌های منشأ شده را توسط برش به هم وصل می‌کند، با ۱ تا ۵ پنج ضلعی در وجوه تولید کرد.

استحکام شیمیایی و مکانیکی، نسبت سطح به حجم بالا، رسانایی الکتریکی خوب از جمله ویژگی‌ها و خواصی

فرآیند مورد بررسی به شرح زیر است:



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

$$E_{ad} = \left( E_{(\text{PATO-Nanocone})} - (E_{(\text{PATO})} + E_{(\text{Nanocone})}) \right) \quad (2)$$

$$\Delta H_{ad} = \left( H_{(\text{PATO-Nanocone})} - (H_{(\text{PATO})} + H_{(\text{Nanocone})}) \right) \quad (3)$$

$$\Delta G_{ad} = \left( G_{(\text{PATO-Nanocone})} - (G_{(\text{PATO})} + G_{(\text{Nanocone})}) \right) \quad (4)$$

$$\Delta S_{ad} = \left( S_{(\text{PATO-Nanocone})} - (S_{(\text{PATO})} + S_{(\text{Nanocone})}) \right) \quad (5)$$

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

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 برحسب کلوین، می‌باشند.

پارامترهای مرتبط با اوربیتال‌های مولکولی نیز از جمله گاف انرژی Eg، درصد کاهش گاف انرژی (% $\Delta E_g$ )، سختی شیمیایی ( $\eta$ )، پتانسیل شیمیایی ( $\mu$ )، الکتروفیلیسته ( $\omega$ ) و بیش‌ترین بار انتقال یافته ( $\Delta N_{max}$ ) نیز با استفاده از روابط ۷ الی ۱۱ محاسبه شدند

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

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

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

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta} \quad (10)$$

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

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

### بحث و نتایج

- آنالیز NBO، اوربیتال‌های جبهه و خواص ساختاری همانطو که در ساختارهای بهینه ارائه شده در شکل ۱ کاملاً مشخص است، به‌منظور پیدا کردن پایدارترین پیکربندی، برهم‌کنش PATO با نانومخروط کربنی در دو حالت متفاوت مورد بررسی قرار گرفت.

در PATO، I-Isomer از سمت گروه تری‌آزول خود در مجاورت جاذب قرار گرفته است و در پیکربندی II-Isomer از سمت حلقه بنزن به صورت موازی با سطح نانومخروط قرار گرفته است. همانطو که مقادیر انرژی جذب سطحی ارائه شده در جدول ۱، نشان می‌دهد که برهم‌کنش PATO با نانومخروط کربنی در هر دو پیکربندی بررسی شده از لحاظ تجربی امکان‌پذیرتر است. نتایج حاصل از محاسبات NBO، نشان داد که در هر سه پیکربندی هیچ‌گونه پیوندی میان PATO و جاذب تشکیل نشده است و جذب در هر سه موقعیت، از نوع شبه شیمیایی است [۱۲-۱۶].

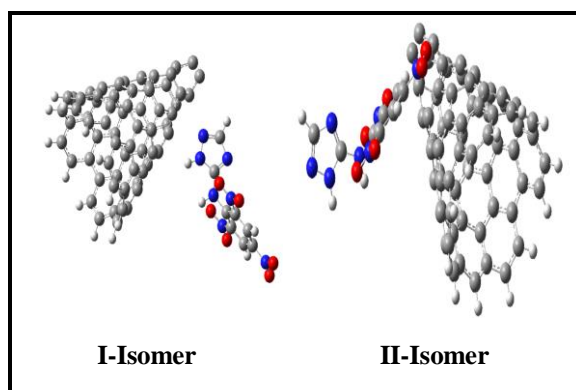
محاسبات IR نیز بر روی ساختارهای بهینه شده نیز صورت گرفت و مقادیر کم‌ترین فرکانس به دست آمده در جدول ۱، ارائه شده‌اند همانطو که مقادیر ارائه شده نشان می‌دهند هیچ‌گونه مقادیر منفی به دست نیامده است که نشان می‌دهد تمامی ساختارهای مطالعه شده در یک حالت کمینه موضعی قرار دارند.

برخی از پارامترهای مرتبط به اوربیتال‌های هومو و لومو و ویژگی‌های ساختاری مانند گاف انرژی، سختی شیمیایی، الکتروفیلیسته، پتانسیل شیمیایی و بیش‌ترین بار انتقال یافته هم محاسبه شدند و نتایج به دست آمده در جدول ۲، ارائه گردید. همان‌گونه که ملاحظه می‌شود مقدار گاف انرژی PATO پس از تعامل با نانوساختار در هر دو ایزومر کاهش محسوسی یافته است.

به عبارتی دیگر، میزان هدایت الکتریکی و خاصیت الکتروکاتالیتیک PATO بعد از جذب شدن بر روی جاذب قوی‌تر شده است زیرا گاف انرژی ارتباطی معکوس با رسانایی دارد. یعنی هر چه ترکیبی دارای گاف انرژی کم-تری باشد، میزان رسانایی آن هم بیش‌تر خواهد بود. پارامتر بعدی که مورد مطالعه قرار گرفت، سختی شیمیایی بود. همانطور که داده‌های ارائه شده در جدول ۱ به وضوح نشان می‌دهند، میزان سختی شیمیایی PATO بعد از جذب شدن آن بر سطح نانوساختار در هر دو ایزومر، کاهش یافته است که این موضوع نشان دهنده این است که ایزومرها دارای واکنش‌پذیری بیش‌تر در مقایسه با PATO خالص هستند. زیرا، ترکیباتی که نرم‌تر هستند انرژی کم‌تری لازم دارند تا انتقالات الکترونی مورد نیاز برای انجام واکنش‌های شیمیایی را انجام دهند [۱۶].

مقدار پتانسیل شیمیایی برای تمامی ساختارها منفی می‌باشد که نشان می‌دهد 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 می‌دهند، همانطور که در مقادیر ارائه شده در جدول ۱ نشان می‌دهند مقدار هر دو پارامتر بعد از جذب شدن PATO بر روی سطح نانو ساختار کاهش چشم‌گیری داشته است که نشان می‌دهد مشتقات PATO و نانو ساختار تمایل کم‌تری به جذب الکترون دارند [۱۸-۳۰].

مقدار ممان دوقطبی برای PATO و کمپلکس‌های آن با نانو مخروط کربنی محاسبه و بررسی گردید و نتایج حاصل در جدول ۲، ارائه شده است. همانطور که مشخص است، در هر دو پیکربندی مقدار ممان دوقطبی دارو بعد از جذب شدن بر روی نانوساختار افزایش یافته است که نشان می‌دهد مشتقات PATO و نانو ساختار حلالیت بیش‌تری در آب در مقایسه با PATO خالص دارند [۱۷-۲۵].



شکل ۳: ساختار بهینه شده PATO و کمپلکس‌های آن با نانومخروط کربنی در دو پیکربندی مختلف

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

	PATO	I-Isomer	II-Isomer
$E_{ad}$ (kJ/mol)	---	-178.612	-151.649
کم‌ترین فرکانس ( $cm^{-1}$ )	10.123	9.458	13.842
طول پیوند	---	1.819	1.682
انرژی نقطه صفر (kJ/mol)	501.982	1089.20	1086.27

جدول ۲- پارامترهای محاسبه شده مرتبط با اوربیتال های جبهه و ممان دو قطبی برای لومستین و مشتقاتش با نقاط کوانتومی گرافن

	$E_H$ (eV)	$E_L$ (eV)	HLG (eV)	$\eta$ (eV)	$\mu$ (eV)	$\omega$ (eV)	$\Delta N_{max}$ (eV)	ممان دو قطبی (دبای)
PATO	-8.460	2.530	13.530	5.495	-2.965	0.800	0.540	1.280
Nanocone	-6.290	2.870	9.160	4.580	-1.710	0.319	0.373	0.000
I-Isomer	-4.950	2.980	7.930	3.965	-0.985	0.122	0.248	4.569
II-Isomer	-4.570	0.930	5.500	2.750	-1.820	0.602	0.462	5.431

تأثیر 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 PATO بر روی سطح نانومخروط کربنی دمای اتاق است و در این دما فرآیند جذب بالاترین راندمان را دارد [۱۳-۱۸]. مقادیر تغییرات آنتروپی و همچنین ثابت تعادل ترمودینامیکی نیز در جدول ۴، ارائه شده است. مقادیر بزرگ ثابت تعادل ترمودینامیکی نشان می‌دهد که برهم‌کنش PATO و نانوجاذب برگشت ناپذیر، یک طرفه و غیر تعادلی است. مقادیر  $k_{td}$  تغییرات آنتروپی نیز نشان دهنده آن است که میزان بی نظمی در حین فرآیند جذب سطحی دارو بر روی سطح نقاط کوانتومی گرافن کاهش یافته است [۳۰-۳۵].

### - پارامترهای ترمودینامیکی

مقادیر تغییرات آنتالپی جذب سطحی و تغییرات انرژی آزاد گیبس محاسبه شده در جدول ۳، ارائه شده‌اند. همانطور که ملاحظه می‌شود مقدار  $\Delta H_{ad}$  برای هر دو ایزومر به شدت منفی است که نشان می‌دهد فرآیند جذب سطحی در هر دو حالت گرمازا است. تأثیر دما بر روی این پارامتر بررسی گردید و همانطور که مشخص است تغییر معناداری در مقدار  $\Delta H_{ad}$  با افزایش دمای محیط به وجود نیامده است. در نتیجه، بر اساس این پارامتر نمی‌توان دمای بهینه برای برهم-کنش لومستین با نانوساختار را مشخص نمود. مقادیر تغییرات انرژی آزاد گیبس، نیز در جدول ۲، ارائه گردید. همانطور که مشخص است برهم‌کنش لومستین با نقاط کوانتومی گرافن خودبخودی است، زیرا مقدار  $\Delta G_{ad}$  برای هر دو پیکربندی به شدت منفی و بزرگ می‌باشند.

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

Temperature(K)	$\Delta G_{ad}$ (KJ/mol)		$\Delta H_{ad}$ (KJ/mol)	
	I-Isomer	II-Isomer	I-Isomer	II-Isomer
278.15	-217.641	-206.020	-177.811	-167.916
288.15	-217.586	-205.965	-177.811	-167.922
298.15	-217.531	-205.909	-177.812	-167.925
308.15	-217.475	-205.851	-177.813	-167.928

318.15	-217.418	-205.792	-177.815	-167.931
328.15	-217.360	-205.732	-177.818	-167.935
338.15	-217.303	-205.673	-177.825	-167.940
348.15	-217.244	-205.613	-177.832	-167.946
358.15	-217.185	-205.552	-177.841	-167.953
368.15	-217.125	-205.491	-177.850	-167.960

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

Temperature(K)	$K_{th}$		$\Delta S_{ad}$ (J/mol)	
	I-Isomer	II-Isomer	I-Isomer	II-Isomer
278.15	$7.464 \times 10^{+40}$	$4.904 \times 10^{+38}$	-177.554	-179.102
288.15	$2.784 \times 10^{+39}$	$2.177 \times 10^{+37}$	-179.178	-180.707
298.15	$1.294 \times 10^{+38}$	$1.190 \times 10^{+36}$	-180.801	-182.310
308.15	$7.339 \times 10^{+36}$	$7.855 \times 10^{+34}$	-182.420	-183.909
318.15	$4.982 \times 10^{+35}$	$6.147 \times 10^{+33}$	-184.036	-185.506
328.15	$3.985 \times 10^{+34}$	$5.617 \times 10^{+32}$	-185.649	-187.100
338.15	$3.701 \times 10^{+33}$	$5.913 \times 10^{+31}$	-187.259	-188.690
348.15	$3.939 \times 10^{+32}$	$7.083 \times 10^{+30}$	-188.866	-190.278
358.15	$4.749 \times 10^{+31}$	$9.550 \times 10^{+29}$	-190.469	-191.862
368.15	$6.423 \times 10^{+30}$	$1.435 \times 10^{+29}$	-192.070	-193.444

### نتیجه گیری

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 برهم کنش لوموستین با نقاط کوانتومی گرافن گرما زا، خودبخودی و از نظر

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

Alanine by Density Functional Theory, Physical Chemistry Research, 6, 639-655.

[14] Jalali Sarvestani, M. R., Ahmadi, R., 2018, Investigating the Effect of Fullerene (C20) Substitution on the Structural and Energetic Properties of Tetryl 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 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, 273-284.

[17] Jalali Sarvestani, M. R., Ahmadi, R., 2020, Adsorption of Tetryl 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., W. J. Hehre, J. A. Johnson, P. E. Klunzinger, J. M. Leonard, I. N. Pham, 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.

[21] Lasboo, F.A., Karimian, M., F. Movahed, Amin, N.G., 2024, Developed Sustainable Green Nanoadsorbents for the Removal of Antibiotics: A Comprehensive Review. International Journal of New Chemistry, 11, 1-14.

[22] Vahed, S.A., Tirabadi, F.H., 2023, Carbon Nanocone as a Potential Adsorbent and Sensor for the Removal and Detection of Ciprofloxacin: DFT Studies. International Journal of New Chemistry, 10, 288-298.

[23] Qomi, M., Reza, M., Sarvestani, J., 2023, Highly Sensitive Voltammetric Determination of Acetaminophen by an Overoxidized Poly ( p-aminophenol ) Modified Glassy Carbon Electrode. International Journal of New Chemistry, 10, 140-150.

[24] Ameji, J.P., Ebune, A.O., Aderemi, I.W., Moyosore, A., 2023, Computational Study and Design of Novel Chemotherapeutic Agents against Hepatocellular Carcinoma. International Journal of New Chemistry, 10, 84-105.

[25] Vahed, S.A., Tirabadi, F.H., 2022, A DFT Investigation on Fullerene ( C20 ) Interaction with Nalidixic Acid. International Journal of New Chemistry, 9, 393-404.

[26] Farahani, R., Madrakian, T., Afkhami, A., 2023, Investigating the performance of a recently synthesized covalent organic framework as an adsorbent for methylene blue: A DFT Study. International Journal of New Chemistry, 9, 383-392.

[27] Reza, M., Sarvestani, J., Doroudi, Z., 2023, Development of an Ultrasound Assisted Ion Pair Based Surfactant-enhanced Liquid - liquid Microextraction Technique Combined with Spectrophotometry for Preconcentration and Determination of Ultra-Trace Amounts of Sulfonamides. International Journal of New Chemistry, 9, 336-350.

[28] Sarabi, S., P.R. Jamaat, Djahaniani, H., 2021, Investigation of the Conversion Process of Verdoheme Hydroxyl Iron ( II ) to Biliverdin Iron ( II ): Theoretical Study. International Journal of New Chemistry, 9, 84-101.

[29] Najafi, F., Pourali, S., Kamran, A., 2021, Comparison of Thermodynamic Functions of Idarubicin Cancer Drug Interaction with Carbon Nanotube: QM / MM studies. International Journal of New Chemistry, 8, 30-40.

[30] Ugochukwu, A.S., Shallengwa, G.A., Uzairu, A., 2021, Quantum and Statistical Study for Evaluating the Cytotoxicity Ability of Some Pyrazole Derivatives as Potent Anti Hiv-1 Agents Inhibitors. International Journal of New Chemistry, 8, 131-141.

[31] Mahmouzdadeh, G., 2021, Intrinsic distortion in the analysis of the Jahn-Teller effect: by Transition state theory ( TST ) and Nitrogen inversion. International Journal of New Chemistry, 8, 386-399.

تجربی امکان پذیر است. داده‌های 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 می‌توان برای توسعه حسگرهای نوین الکتروشیمیایی به‌منظور اندازه‌گیری 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., R. Heydari, H. Rai, J. Jazayeri, 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., T. C. Cordova-Sintjago, D. D. Pant, 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., A. Ghosh, S. Jana, N. C. Murmu, S. K. Mukhopadhyay, 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.

[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., S. Zhu, H. Li, 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, 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

- [32] Tafti, A.G., Rashidi, A., Yazdanshenas, M.E., 2021, Synthesis of polyphenolic mesoporous nanocomposite for removal of acid dye from aqueous media : Adsorption studies Adsorption studies of anionic dye on polyphenolic mesoporous compound. *International Journal of New Chemistry*, 8 ,515–536.
- [33] Mohasseb, A., 2019, Adsorption of Tetryl on the Surface of Carbon Nanocone: A Theoretical Investigation. *International Journal of New Chemistry*, 6, 215–223.
- [34] Ahmadi, R., Rezaie Asl, A., 2015, Computational Study of Chemical Properties in Fullerene Derivatives of Enalapril Drug. *International Journal of New Chemistry*, 2, 17–26.
- [35] Uroomiye, S.S., 2019, Investigating the Effect of Fullerene on the Basicity of Paraphenylenediamine by using the Quantum Chemistry Methods. *International Journal of New Chemistry*, 6 , 156–162.