

بررسی نظری برهمکنش داروی ۲-تیواوراسیل با نانومخروط بورنیتريد

فاطمه آبگون^{۱*}، داود فرمانزاده^۲

۱ و * - دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران،

(naghme.abgoon@gmail.com)

۲ - استاد، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران،

(d.farmanzad@umz.ac.ir)

واژگان کلیدی: ۲-تیواوراسیل، نانو مخروط، دارورسانی، بور نیتريد.

1- مقدمه

۱-۱- نانومخروط بور نیتريد

نانومخروط‌های بورنیتريد به عنوان مواد نانوساختاری با خواص منحصر به فرد مانند زیست سازگاری، خواص نوری، افزایش انحلال پذیری دارو، هدف گیری خاص و آزاد سازی کنترل شده در دارورسانی مورد توجه قرار گرفته اند. این ویژگی ها، نانومخروط‌های بورنیتريد را به گزینه ای جذاب برای سامانه های دارورسانی پیشرفته تبدیل کرده است [۱].

۱-۲- داروی ۲- تیواوراسیل

داروی ۲- تیواوراسیل یک داروی ضد تیروئیدی است که برای درمان پرکاری تیروئید و بیماری گریوز استفاده می شود. این دارو با مهار آنزیم تیروپراکسیداز، تولید هورمون های تیروئیدی را کاهش می دهد. عوارض جانبی ممکن، شامل واکنش های آلرژیک، اختلالات کبدی و کاهش تعداد گلبول های سفید خون است [۲].

2- روش محاسباتی

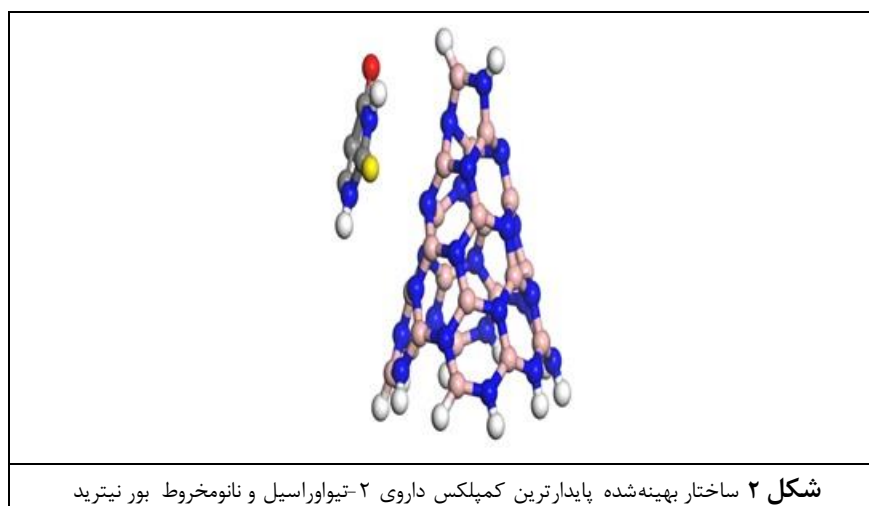
در این پژوهش، ساختارها با استفاده از نرم افزار Dmol3 در سطح نظریه تابعیت چگالی با تقریب GGA و تابعیت PBE برای توصیف تبادل و همبستگی و مجموعه پایه DNP بهینه شدند [۳]. نانومخروط انتخاب شده در این کار، از نوع نانومخروط بورنیتريد متشکل از ۲۴ اتم بور و ۲۴ اتم نیتروژن به طول ۱۰ آنگستروم می باشد که به منظور جلوگیری از اثرات مرزی اتم های انتهایی با هیدروژن اشباع شدند. برای محاسبه انرژی جذب (E_{ads}) دارو بر روی نانومخروط از رابطه ۱ استفاده شده است، که در آن E_{BN}، E_{drug}، E_{drug-BN} و E_{ads} به ترتیب انرژی های بورنیتريد، دارو کمپلکس دارو-بورنیتريد و جذب می باشند.

$$E_{ads} = E_{drug_BN} - (E_{drug} + E_{BN}) \quad (1)$$

۳- بحث و نتیجه گیری

هدف از این پژوهش، بررسی برهم کنش (جذب) ۲-تیواوراسیل به عنوان داروی ضد تیروئید با نانومخروط بورنیتريد به عنوان نانوحامل، برای افزایش فراهمی زیستی و پایداری این دارو است. در ابتدا، ساختار هر دو ترکیب ۲-تیواوراسیل و نانومخروط بورنیتريد به طور مجزا بهینه سازی شدند (شکل ۱). در مرحله ی بعد، مولکول دارو، در فاصله های مختلف از نانومخروط و جهت های مناسبی قرار داده شد و ساختار کمپلکس حاصل از نانومخروط و ۲-تیواوراسیل بهینه سازی شد. در هر مورد انرژی

جذب ترکیب دارویی و نانومخروط با استفاده از رابطه ۱ محاسبه گردید. دامنه‌ی انرژی‌های جذب محاسبه شده برای ساختارهای کمپلکس‌های حاصله از ۴۶/۶۷۸- تا ۲۶۵/۴۸۷- کیلوژول بر مول به‌دست آمد. با توجه به انرژی‌های جذب ارزیابی‌شده، مشخص گردید که جذب ترکیب دارویی ۲-تیواوراسیل، بر روی نانومخروط بورنیتريد، از نوع شیمیایی می‌باشد. در شکل ۲، پایدارترین ساختار کمپلکس نانومخروط بور-نیتريد با ۲-تیواوراسیل، که دارای بیشترین انرژی جذب می‌باشد، به نمایش گذاشته شده است.



منابع و مراجع

- [1] Sun, Z.; Wang, S.; Xiong, H.; Wu, K.; Shi, J. Optimal nanocone geometry for water flow. AICHE Journal, (2022), 68, e17543.
- [2] Léger, J.; Delcour, C.; Carel, J.C. Fetal and neonatal thyroid dysfunction. The Journal of Clinical Endocrinology & Metabolism (2022)107, 836–846.
- [3] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, Phys. Rev. Lett. 77 (18) (1996) 3865–3868.