



# بررسی خصوصیات ترمودینامیکی و الکترونیکی جذب فنیل زین بر نانوقفس فولرن

شیوا توکلی | اسید علی احمدی\* | دادخدا غضنفری

گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی ایران، واحد کرمان، ایران

**چکیده:** مقاله حاضر، با استفاده از تئوری تابعیت چگالی در سطح کوانتومی B3LYP/6-311+G (d, p) برای تعیین ویژگی‌های واکنش‌پذیری جذب فنیل زین به عنوان داروی ضد افسردگی بر C60 (ih) به عنوان حامل دارویی در فاز گازی انجام شده است. ویژگی شیمیایی (ممان دو قطبی)، ویژگی‌های ترمودینامیکی (انرژی آزاد گیبس، آنتالپی، آنتروپی و همچنین ظرفیت حرارتی) و پارامترهای الکترونیکی ( $\sigma$ ,  $\mu$ ,  $\omega$ ,  $\chi$  و  $\eta$ ) برای این دارو محاسبه شدند. براساس محاسبات کوانتومی انجام شده فنیل زین پایداری و واکنش‌پذیری مناسبی را نشان می‌دهد. با توجه به ساختار شیمیایی فنیل زین سه جایگاه فعال برای پیوند شیمیایی فنیل زین با فولرن یافت شده است، که همه آنها با توجه به مقدار فرکانس مثبت و انرژی پیوندی منفی، پایداری ترمودینامیکی را نشان می‌دهند.

**واژگان کلیدی:** فنیل زین، C60, Bucky ball, فعالیت، پایداری، DFT.

ahmadi.iauk58@gmail.com

با حساسیت و ویژگی مطلوب برای مطالعه فنیل زین در ادرار طراحی شده است. داروهای متفاوت، از جمله مشتقات هیدرازین با استفاده از استیلاسیون متابولیزه می‌شود [۴،۵]. به نظر می‌رسد متابولیسیم فنیل زین به عنوان یک مشتق هیدرازین با استفاده از استیلاسیون چند شکلی ممکن باشد [۴]. در ۷۲ بیمار سرپایی مبتلا به افسردگی روان رنجور اثر ضد افسردگی قابل توجه فنیل زین در مقایسه با استیلاتورهای سریع نشان داده شد. اگرچه فنیل زین در مقایسه با دارونما برای استیلاتورهای سریع تأثیر زیادی نشان نداد، اما تأثیرات قابل توجه آن در استیلاتورهای کند تأیید شده است [۴-۸]. تمامی ویژگی استیله شدن فنیل زین و

## ۱- مقدمه

فنیل زین (۲-فنیل اتیل هیدرازین؛ PLZ) به عنوان داروی ضد افسردگی، دارای اثرات مهارکننده قوی و برگشت ناپذیری بر مونوآمین اکسیداز A (MAO) و B است [۱،۲]. تجویز فنیل زین معمولاً برای درمان اختلالات وحشت و افسردگی، به ویژه در رابطه با هراس و اضطراب است. پیریدازین، فتالازینون و چندین مشتق جایگزین فتالازینون از داروی فنلین تهیه شدند. از ترکیبات فلورسنت ذکر شده برای بررسی داروها استفاده شده است [۳]. در هیچکدام از این مشتقات اثر بخشی دارو بر پایه ویژگی شیمیایی آن مشخص نشده است و با استفاده از آزمایشی

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۴/۰۸

زمستان ۱۴۰۰ | شماره ۴ | سال هشتم

۹۰

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۵/۲۲

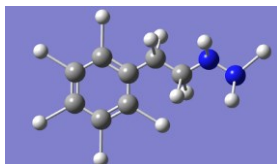
DOR: 20.1001.1.24235628.1400.8.4.10.5



کلیه ویژگی ترمودینامیکی از جمله انرژی آزاد گیبس، آنتالپی، آنتروپی و ظرفیت گرمایی با روش یکسان کوانتومی محاسبه شدند و همچنین، ویژگی الکترونیکی از جمله سختی، نرمی، الکترونگاتیوی، الکترونخواهی و به خصوص پتانسیل شیمیایی برای ترکیب دارو با استفاده از سطح کوانتومی یکسان محاسبه شد.

### ۳- نتایج و بحث

مقالات پیشین، اصلاح کارآمد خصوصیات الکتریکی، فعالیت‌های شیمیایی و پتانسیل واکنش را هنگام استفاده نانوقفس‌ها به همراه اتم‌های فلزی نشان داده است [۲۴]. بنابراین، بر طبق استناد به مقالات پیشین سطح کوانتومی  $B3LYP/6-311+G(d,p)$  در پژوهش حاضر برای بهینه‌سازی ساختارهای متفاوت (دارو، نانو ساختار فولرن و کمپلکس دارو-فولرن)، استفاده شده است. محاسبه خطای تصحیح مجموعه پایه (BSSE) به اندازه  $0.0002$  کیلو کالری برای مجموعه پایه های  $6-31$  و  $6-311$  و  $B3LYP/6-311+G(d,p)$  نشان داد مجموعه پایه  $B3LYP/6-311+G(d,p)$  دقت قابل قبولی برای انجام محاسبات ویژگی شیمیایی و ترمودینامیکی و الکترونیکی را دارا است. بهینه‌سازی ساختار فنیل زین در شکل ۱ نشان داده شده است. فنیل زین دارای سه نقطه فعال شیمیایی است، از جمله دو اتم نیتروژن همراه با یک حلقه فنیل، که موقعیت‌های متفاوت شیمیایی و همچنین، الکتروشیمیایی را در فنیل زین به خود اختصاص می‌دهد. اثرات گوناگونی بر روی واکنش‌های شیمیایی با چگالی الکترونی در هر یک از این موقعیت‌ها اعمال می‌شود. بنابراین، رفتارهای شیمیایی مطلوب‌تری را می‌توان در حضور یک حلقه فنیل بدلیل داشتن چگالی الکترونی فعال و زیاد در فاز گازی بدست آورد. استفاده از گسترش نفوذ و افزایش اربیتال  $d,p$  در مجموعه پایه بکار گرفته شده نشان از تاثیر قابل قبول پتانسیل موثر هسته در محاسبات است که تکرار محاسبات را با مجموعه پایه‌های متفاوت منتفی می‌کند [۲۵].



همچنین، مشتقات آن می‌توانست با استفاده از داده‌های محاسبات کوانتومی تایید شود.

اثرات دارو با استفاده از حامل‌های دارویی در محیط بدن بهبود بخشیده شده اند یکی از این حامل‌ها ترکیبات نانو ساختار کربنی هستند که رهایش دارو و انتقال آن را بهبود می‌دهند باکی بال ( $C60$ ) در مواد متفاوت از جمله مواد شیمیایی با خاصیت سمی و غیرسمی [۹]. رنگ [۱۰]، و همچنین فاضلاب [۱۳-۱۱، ۵]، به عنوان جاذب [۸] استفاده شده است. محاسبات نظری برای همه مطالعات میدانی از جمله نانوکلیج [۸] با استفاده از تئوری تابعی چگالی [۱۴-۱۸] همراه با محاسبات دینامیک مولکولی انجام شد [۱۹-۲۲]. در این راستا کارهای تئوری دارویی کمتر به چشم می‌خورد.

در مطالعه حاضر، با توجه به مجموعه پایه  $B3LYP/6-311+G(d,p)$ ، از باکی بال ( $C60$ ) به عنوان جاذب (حامل) فنیل زین (داروی ضد افسردگی) در فاز گازی استفاده شده است. به جهت بررسی پدیده جذب نقاط با قابلیت اتصال در ساختار دارو (فعال شیمیایی) مشخص شده اند و انرژی پیوندی آنها محاسبه شده است و با در نظر گرفتن خطای تصحیحی مجموعه پایه،  $B3LYP/6-311+G(d,p)$  برای انجام محاسبات مربوط به پایداری ساختار و فرکانس و ویژگی ترمودینامیکی و ویژگی الکترونیکی مورد استفاده قرار گرفت.

### ۲- روش‌های محاسبات

استفاده از محاسبات کوانتومی شیمیایی براساس نرم‌افزار Gaussian 03 [۲۳] است که روی ابر رایانه‌ها اجرا می‌شود. از تئوری تابعی چگالی (DFT) با سه عملکرد ترکیبی پارامتر Becke B3LYP و مجموعه مبنای  $6-311+g(d,p)$  برای انجام بهینه‌سازی هندسه کامل، فرکانس شیمیایی، شیب میدان الکتریکی، مشخصات ترمودینامیکی و پارامترهای الکترونیکی استفاده شد. در مطالعه حاضر از باکی بال کربنی ( $C60$  ih) به عنوان جاذب یا حامل دارو استفاده شده است. برای محاسبه انرژی جذب (پیوندی) از رابطه زیر استفاده شده است:

$$E_{ads} = E_{(B-ph)} - (E_{phenelzine} + E_{backyball})$$

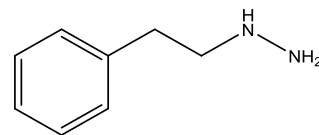
شکاف‌های HOMO-LUMO کوچکتر، شرایط پایدارتر حاصل می‌شود. همچنین، منعکس کننده هدایت بهتر سیستم‌های آروماتیک بزرگ مانند نانوبورن‌های گرافن است و نیم‌رساناهای عالی ایجاد می‌کند. این به دلیل شکاف باند هدایت کمتر است که منجر به جریان الکتریکی حرکات الکترون می‌شود. HOMO و LUMO توجه بسیاری را به خود جلب کرده و بینش قابل توجهی در مورد ماهیت واکنش‌ها با توجه به برهم کنش اوربیتال‌ها ارائه می‌دهند تا نتایج واکنش را کنترل کنند. الکترون‌های ضعیف با انرژی HOMO برای درگیر شدن در واکنش‌های شیمیایی تأمین می‌شوند. مشارکت شدید فنیل زین در واکنش‌های شیمیایی با انرژی HOMO آن ارتباط دارد. سهم به عنوان اهدا کننده الکترون در واکنش‌های شیمیایی به اتم الکترون منفی (N) به عنوان مشخصه ساختار شیمیایی فنیل زین مربوط است. داده‌ها با توجه به اوربیتال‌های مرز فنیل زین (HOMO) و (LUMO) در جدول ۱ نشان داده شده است.

جدول ۱: داده‌های انرژی و مومنتوم دو قطبی فنیل زین با روش

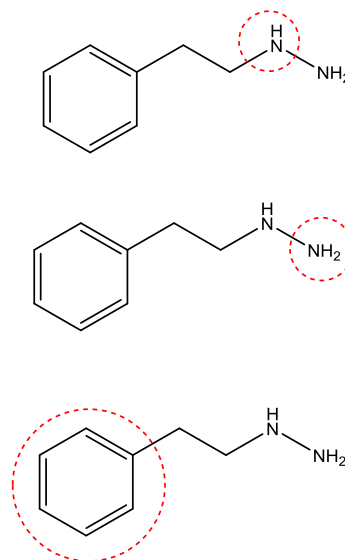
B3LYP/6-311+G (d, p)

phenelzine	gas
Energy	-72.28kJ
Dipole moment(Debye)	-0.5462
HOMO	$-498.71 \times 10^{19} \text{eV}$
LUMO	$-252.70 \times 10^{19} \text{eV}$
Band Gap energy	$-246.01 \times 10^{19} \text{eV}$

قطبیت مرکب از طریق ممان دو قطبی در محیط واکنش وارد می‌شود. بر اساس جدول ۱، مقدار  $D = 0.5462$  برای ممان دو قطبی فنیل زین در فاز گازی بدست آمده است. ظهور قطبیت فنیل زین با اتم‌های الکترون منفی (اتم N) مرتبط است که در ساختار شیمیایی فنیل زین وجود دارد. و عملکرد دارو را در محیط‌های با قطبیت بالا فراهم می‌کند.



شکل ۱: ساختار بهینه فنیل زین با B3LYP/6-311+G (d, p)



شکل ۲: موقعیتهای فعال فنیل زین

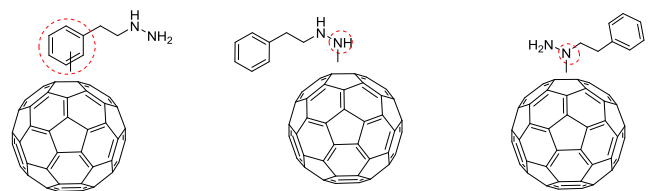
انرژی HOMO و LUMO برای بدست آوردن پارامترهای واکنش‌پذیری شیمیایی اهمیت زیادی دارند. سطوح بالاتر LUMO نشان دهنده پذیرش بالاتر الکترون در مولکول‌ها است. انرژی HOMO و LUMO توانایی شناسایی و پیش بینی مقدار مقاومت و پایداری ترکیبات شیمیایی را دارند. بالاترین درجه تحریک الکترون در انرژی شکاف باند HOMO-LUMO اتفاق می‌افتد، مقدار  $-243.01$  الکترون ولت برای انرژی شکاف باند، هم مقدار واکنش‌پذیری آسان فنیل زین را نشان می‌دهد. با توجه به اینکه انرژی این مدارهای مرزی، مدارهای دارای سطح انرژی متفاوت را تحمل می‌کنند. به ویژه، در مورد سیستم‌های آروماتیک شیمیایی بزرگ، تحرک الکترون‌های  $\pi$  در اثر شکاف‌های باند کوچک HOMO-LUMO ایجاد می‌شود، که حرکت الکترون را به سطح انرژی نزدیک که بالاتر از سطح فعلی است تسهیل می‌کند [۲۶-۲۸].

توزیع انرژی بالاتر در سراسر مولکول توسط الکترون  $\pi$  همراه، بیشتر در سیستم‌های پیوسته بزرگ مزدوج  $\pi$  بدست می‌آید و منجر به ایجاد شرایط پایدارتر می‌شود. بنابراین، با وجود

محیط پایدار است، انرژی پنهان در پیوندهای شیمیایی فنیل زین با منفی بودن انرژی نشان داده می‌شود.

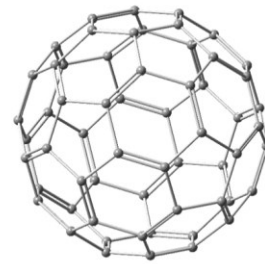
از دست دادن یا به دست آوردن انرژی با واکنش‌های شیمیایی را می‌توان به عنوان انرژی اتم توصیف کرد که همراه با از دست دادن یا به دست آوردن الکترون است. واکنش‌های گرما زا واکنش‌های شیمیایی هستند که انرژی آزاد می‌کنند، در حالی که واکنش‌های گرماگیر انرژی را جذب می‌کنند. نخست، منجر به انرژی منفی می‌شود که با علامت منفی نشان داده می‌شود، در حالی که دومی منجر به انرژی مثبت با علامت مثبت می‌شود. در صورت افزودن الکترون به اتمهای خنثی (اولین میل الکترون) انرژی آزاد می‌شود و منجر به منفی شدن میل ترکیبی اول می‌شود. با این حال، مقادیر بیشتری انرژی برای افزودن الکترون به یونهای منفی (میل الکترون دوم)، غلبه بر آزاد شدن انرژی ناشی از اتصال الکترونها، و نشانگر مثبت بودن میل‌های الکترون دوم، مورد نیاز است.

الکتروافینیتی (انرژی میل ترکیبی الکترون) (EA)، مقدار مثبت ۲۵۲٫۷ الکترون ولت برای فنیل زین تمایل آن به دادن الکترون یا تمایل به اهدای الکترون را نشان می‌دهد. از تئوری کوپمن با استفاده از روش DFT برای استخراج پارامترهای واکنش مولکولی مانند الکترونگاتیوی ( $\chi$ )، نرمی ( $\sigma$ )، سختی ( $\eta$ ) و همچنین نشانگر الکتروفیلیسیست ( $\omega$ ) استفاده شد. قدرت جذب اتم‌ها یا مولکول‌ها با ( $\chi$ ) نشان داده می‌شود که توسط HOMO و LUMO بدست می‌آید. حالت‌های پایدار و واکنشی مولکولهای شیمیایی با  $\eta$  نشان داده شده است، مقدار بزرگ و مثبت سختی نشان از پایداری ترکیب در این شرایط است در حالی که ظرفیت پذیرش الکترون آنها با  $\sigma$  نشان داده شده است. مقدار کوچک و مثبت نرمی نشان می‌دهد فنیل زین تمایل زیادی به واکنش در محیط شیمیایی را دارد. پارامترهای واکنش فنیل زین در فاز گازی در جدول ۲ نشان داده شده است. بر اساس این جدول، فنیل زین در واکنش‌های شیمیایی بسیار پایدار و واکنش پذیر است و به عنوان یک ترکیب فعال شیمیایی عمل می‌کند. در حقیقت، داده‌ها نشان می‌دهند فنیل زین روی C60 به عنوان یک ترکیب شیمیایی فعال جذب میشود و برای اثبات نحوه جذب شیمیایی آن جدول ۳ انرژی‌های پیوندی جذب را نشان می‌دهد.



شکل ۳: سه منطقه فعال برای پذیرش C<sub>60</sub> کمپلکس فنیل زین-C<sub>60</sub>

شکل ۳، نشانگر سه منطقه فعال برای پذیرش C60 با فنیل زین است. همانطور که در این شکل نشان داده شده است، سیستم متقارن C60 منجر به شرایط مشابهی برای مشارکت همه سایت‌ها در واکنش‌های شیمیایی می‌شود، به این معنی که انتخاب موقعیت‌ها منجر به هیچ تفاوتی در واکنش‌های حاصل نمی‌شود. ساختار اصلی باکی‌بال و ساختار آن پس از بهینه‌سازی در شکل ۴ مشاهده می‌شود.



شکل ۴: ساختار بهینه C60 (ih) با روش E(-738.33kJ) B3LYP/6-311+G (d, p)

به قابلیت انجام کار و انجام یک واکنش شیمیایی انرژی گفته می‌شود. انرژی ذخیره شده در پیوندهای شیمیایی به عنوان انرژی پتانسیل شیمیایی شناخته می‌شود، که یکی از ویژگی‌های مهم ترمودینامیکی است که می‌تواند در زمینه‌های متفاوت علمی از جمله شیمی، فیزیک، زیست‌شناسی و همچنین، مهندسی شیمی استفاده شود. این ویژگی محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی را در مواد شیمیایی با توجه به ساختار فضایی و دما امکان پذیر می‌کند. با فرض ثابت بودن فشار و دما، می‌توان از پتانسیل شیمیایی استفاده کرد و مقدار پایداری مواد، ترکیبات شیمیایی و محلول‌ها را تعیین کرد. پایداری فنیل زین در فاز گازی با مقدار 375.71E19- برای پتانسیل شیمیایی آن مشخص شد مقدار منفی پتانسیل شیمیایی نشان می‌دهد. ساختار فنیل زین در دمای

جدول ۲: پارامترهای الکترونیکی فنیل زین در فاز گازی با روش  
B3LYP/6-311+G (d, p) **مراجع**

phenelzine	IP (eV)	EA (eV)	$\mu$ (eV)	$\eta$ (eV)	$\chi$ (eV)	$\sigma$ (eV)	$\omega$ (eV)
gas	498.71E19	252.70E19	-375.71E19	123.004E19	375.71E19	8.13E-22	5.73E2 1

[1] M. B. Parent, M .K. Habib, G. B. Baker, "Task-dependent effects of the antidepressant/antipanic drug phenelzine on memory," *Psychopharmacology*, 142, 280-288, 1999.

[2] P. Hassanzadeh, A. Hassanzadeh, "Effects of psychotropic drugs on nerve growth factor protein levels in the rat brain" *Physiology and Pharmacology*, 13, 244-252, 2009.

[3] B. Caddy, A. H. Stead, "Some fluorescent derivatives of the drug phenelzine" *Analyst*, 103, 937-949, 1978.

[4] E.C. Johnstone, "The relationship between acetylator status and inhibition of monoamine oxidase, excretion of free drug and antidepressant response in depressed patients on phenelzine" *Psychopharmacologia*, 46, 289-294, 1976.

[5] S. Wang, K. Poon, Z. Cai, "Removal and metabolism of triclosan by three different microalgal species in aquatic environment." *Journal of hazardous materials*, 342, 643-650, 2018.

[6] B. G. AS, J. C. Prasana, S. Muthu, C. S. Abraham, H. A. David, "Spectroscopic and quantum/classical mechanics based computational studies to compare the ability of andrographolide and its derivative to inhibit nitric oxide synthase" *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 218, 374-387, 2019.

[7] Z. Wang, H. F. Su, Y. Z. Tan, S. Schein, S. C. Lin, W. Liu, S. A. Wang, W. G. Wang, C. H.

انرژی ترکیبات نشان داده شده در شکل ۳ را می‌توان در جدول ۳ مشاهده کرد. با توجه به ممان دو قطبی کمپلکس‌ها، تمام منطقه‌های فعال دارای پتانسیل تأثیر در محیط‌های قطبی هستند. پایداری سازه‌ها برای همه این سایت‌ها در محیط‌های شیمیایی با استفاده از مقدار منفی انرژی پیوندی جذب بدست آمد. در حالی که، ساختار ۱ منفی‌ترین مقدار را داراست بالاترین پایداری را از خود نشان داد و این پایداری نشان دهنده خود بخودی بودن فعالیت جذب بر فولرن است.

جدول ۳: داده‌های انرژی و ممان دو قطبی کمپلکس‌های فنلزن-  
C60

	1	2	3
E(kcal/mol)(formation energy)	-1050.214	-1045.206	-1031.380
$\mu$ (D)	1.7817	1.8481	1.6730
$\Delta E$ (ads/kJ)(binding energy)	-3600.289	-3579.255	-3521.186

افزون بر محاسبه مقدار انرژی پیوندی (جذب) که منفی بودن آن نشان از پایدار بودن و خودبخودی انجام شدن فرایند جذب را نشان می‌دهد مقادیر فرکانس ارتعاش مثبت برای نوع ساختار پیشنهادی در ترکیب ۱ به مقدار  $857.6\text{cm}^{-1}$  و برای ساختار ۲ به مقدار  $762.4\text{cm}^{-1}$  و مقدار  $695.8\text{cm}^{-1}$  برای ساختار پیشنهادی ۳ دلیل بر پایداری ساختارهای مورد نظر است.

#### ۴- نتیجه گیری

واکنش شیمیایی فنلزن و استفاده از آن روی باکی بال (C60) در مقاله حاضر با استفاده از DFT B3LYP/6-311+G (d, p) در فاز گازی مورد مطالعه قرار گرفت. مشخص شد که فنلزن با توجه به ساختار شیمیایی و پارامترهای الکترونیکی اش، مولکولی فعال است و منجر به خست‌سازی در C60 با پایداری قابل توجه می‌شود. هر سه سایت فعال فنلزن ثبات ترمودینامیکی را نشان می‌دهند، در حالی که ساختار ۱ دارای بالاترین پایداری است.

Journal of Molecular Structure, 924, 313-321, 2009.

[15] M. S. Garelli, F. V. Kusmartsev, "Buckyball quantum computer: realization of a quantum gate." The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems, 48, 199-206, 2005.

[16] A. Takzare, D. D. Ghafoor, A. F. Siddiqi, S. Ravali, M. Shalhaf, M. Bakhtiar, "Trachyspermum copticum essential oil incorporated niosome for cancer treatment" Journal of Drug Delivery Science and Technology, 52, 818-824, 2019.

[17] A. Ceulemans, J. T. Muya, G. Gopakumar, M. T. Nguyen, "Chemical bonding in the boron buckyball" Chemical Physics Letters, 461, 226-228, 2008.

[18] J. T. Muya, M. T. Nguyen, A. Ceulemans, "Quantum chemistry study of symmetric methyne substitution patterns in the boron buckyball." Chemical Physics Letters, 483, 101-106, 2009.

[19] S. Jo, S. Kim, B. H. Lee, A. Tandon, B. Kim, S. H. Park, M. K. Kim, "Fabrication and characterization of finite-size DNA 2D ring and 3D buckyball structures." International journal of molecular sciences, 19, 1895, 2018.

[20] C. Wang, W. Huang, J. Lin, F. Fang, X. Wang, H. Wang, "Triclosan-induced liver and brain injury in zebrafish (*Danio rerio*) via abnormal expression of miR-125 regulated by PKC $\alpha$ /Nrf2/p53 signaling pathways." Chemosphere, 241, 125086, 2020.

[21] M. Shen, W. Jia, Y. You, Y. Hu, F. Li, S. Tian, J. Li, Y. Jin, D. Han, "Luminescent properties of CdTe quantum dots synthesized using 3-mercaptopropionic acid reduction of tellurium

Tung, D. Sun, L. S. Zheng, "Assembly of silver trigons into a buckyball-like Ag<sub>180</sub> nanocage" Proceedings of the National Academy of Sciences, 114, 12132-12137, 2017.

[8] S. H. Kang, G. Kim, Y. K. Kwon, "Adsorption properties of chalcogen atoms on a golden buckyball Au<sub>16</sub>– from first principles" Journal of Physics: Condensed Matter, 23, 505301, 2011.

[9] S. Mallawaarachchi, M. Premaratne, P. K. Maini, "Superradiant cancer hyperthermia using a buckyball assembly of quantum dot emitters" IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 25, 1-8, 2018.

[10] L. Kalaugher, "Buckyball pioneer dies" Physics World, 18, 9, 2005.

[11] M. Adolfsson-Erici, M. Pettersson, J. Parkkonen, J. Sturve, "Triclosan, a commonly used bactericide found in human milk and in the aquatic environment in Sweden" Chemosphere, 46, 1485-1489, 2002.

[12] M. Zhao, Z. Huang, S. Wang, L. Zhang, C. Wang, "Experimental and DFT study on the selective adsorption mechanism of Au (III) using amidinothiourea-functionalized UiO-66-NH<sub>2</sub>" Microporous and Mesoporous Materials, 294, 109905, 2020.

[13] X. M. Lopez-Fernandez, H. R. Khataee, M. Y. Ibrahim, S. Sourchi, L. Eskandari, M. T. Noranis, "Computing optimal electronic and mathematical properties of Buckyball nanoparticle using graph algorithms" COMPEL-The international journal for computation and mathematics in electrical and electronic engineering, 31, 2, 387-400, 2012.

[14] A. E. Yavuz, S. H. Bayarı, N. Kazancı, "Structural and vibrational study of maprotiline"

dioxide directly.” *Nanoscale research letters*, 8, 1-6, 2013.

[22] Y. Shirai, A. J. Osgood, Y. Zhao, K. F. Kelly, J. M. Tour, “Directional control in thermally driven single-molecule nanocars.” *Nano Letters*, 5, 2330-2334, 2005.

[23] M. Caricato, M. J. Frisch, eds., *Gaussian 09: IOps Reference*. Gaussian, 2009.

[24] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, “Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene.” *science*, 321, 385-388, 2008.

[25] S. Chiodo, N. Russo, E. Sicilia “LANL2DZ basis sets recontracted in the framework of density functional Theory” *The Journal of Chemical Physics*, 125, 104107, 2006.

[26] J. C. Faver, Z. Zheng, K. M. Merz Jr., “Model for the fast estimation of basis set superposition error in biomolecular systems” *The Journal of Chemical Physics*, 135, 144110, 2011.

[27] J. J. Sahayarayan, K. S. Rajan, R. Vidhyavathi, M. Nachiappan, D. Prabhu, S. Alfarraj, S. Arokiyaraj, A. N. Daniel, “In-silico protein-ligand docking studies against the estrogen protein of breast cancer using pharmacophore based virtual screening approaches” *Saudi Journal of Biological Sciences*, 28(1), 400-407, 2020.

[28] J. Luo, R. Zhang, X. Wang, Z. Hou, S. Guo, B. Jiang, “Binding properties of marine bromophenols with human protein tyrosine phosphatase 1B: Molecular docking, surface plasmon resonance and cellular insulin resistance study” *International Journal of Biological Macromolecules*, 163, 200-208, 2020.



# Investigation of thermodynamic and electronic properties of Phenelzine adsorption on fullerene Nanocage

S. Tavakoli, S. A. Ahmadi\*, D. Ghazanfari

Department of Chemistry, Kerman Branch, Islamic Azad University, Kerman, Iran

**Abstract:** The present paper is performed using the density functional theory at the quantum level of B3LYP / 6-311 + G (d, p) to determine the reactivity properties of phenylzine adsorption as an antidepressant on C60 (ih) as a drug carrier in the gas phase. Chemical properties (dipole moment), thermodynamic properties (Gibbs free energy, enthalpy, entropy and heat capacity) and electronic parameters ( $\sigma$ ,  $\mu$ ,  $\omega$ ,  $\chi$ , and  $\eta$ ) were calculated for this drug. Based on quantum calculations, phenylzine shows good stability and reactivity. Due to the chemical structure of phenylzine, three active sites have been found for the chemical bonding of phenylzine with fullerene, all of which show thermodynamic stability with respect to the positive frequency value and the negative bond energy.

**Keywords:** DFT, phenelzine, C60, Bucky ball, Reactivity, Stability.