Journal of Ilam University of Medical Sciences

P-ISSN: 1563-4728
E-ISSN: 2588-3135

Theoretical Study of Adsorption of Genistein on Graphene and Graphene Doped with Metal Atoms (Ni, Ti, Cr, Se)

Marziyeh Choupani[1], Afshar Alihosseini[1*], Majid Monajjemi[1], Hossein Sakhaeinia[1]

[1.] Department of Chemical Engineering, Faculty of Technical Engineering, Central Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Article Info

Article type:
Research article

Article History:
Received: 02 May 2022
Revised: 29 June 2022
Accepted: 14 August 2022
Published Online: 17 October 2022

**** Correspondence to:***
Afshar Alihosseini
Department of Chemical Engineering, Faculty of Technical Engineering, Central Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.
Email:
Afs.alihosseini@iauctb.ac.ir

A B S T R A C T

Introduction: Genistein is an isoflavone that is used as a drug to stop various types of cancer cells, such as breast and prostate cancer. This study aimed to perform molecular simulation of the adsorption process of genistein molecule on pure graphene and genistein on graphene doped with metal atoms (Ni, Ti, Se, and Cr) to increase the adsorption efficiency of the genistein-graphene molecule.

Material & Methods: In this study, a graphene plate (dimensions: 4 × 4) was placed next to the genistein molecule at a distance of 1 to 5 angstroms, using HyperChem Professional software (version 8.0.10). The density functional theory (DFT) was used to simulate the adsorption of Genistein-graphene, and the Gaussian software (version 09), hybrid method (B3LYP), and the 6-31G base set were used to optimally design the molecular structure.

Findings: Based on the obtained results, the adsorption energy of genistein-graphene doped with metal atoms Ni, Se, Ti, and Cr was determined at 318.154, 954.080, 972.745, and 1236.149 kcal/mole, respectively, and the energy gap of genistein-graphene doped with Ni, Ti, Se, and Cr was estimated to be 85.422, 92.476, 102.396, and 94.694 kcal/mol, respectively.

Discussion & Conclusion: The results of this study show that the presence of graphene-doped Ni atoms increases the electron charge density. The energy gap of genistein-graphene doped with Ni atoms indicates reactivity and high electron charge density of this compound and can be used as a suitable option to increase the uptake efficiency of the genistein drug molecule.

Keywords: Adsorption, Density functional theory, Doped, Energy gap, Genistein

➢ **How to cite this paper**

Choupani M, Alihosseini A, Monajjemi M, Sakhaeinia H. Theoretical Study of Adsorption of Genistein on Graphene and Graphene Doped with Metal Atoms (Ni, Ti, Cr, Se). Journal of Ilam University of Medical Sciences. 2022;30(4): 94-105.

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]

[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]

© The Author(s)

مجله دانشگاه علوم پزشکی ایلام
JIUMS
P-ISSN: ۱۵۶۳-۴۷۲۸
E-ISSN: ۲۵۸۸-۳۱۳۵

مطالعهٔ نظری جذب مولکول دارویی جنستین بر صفحهٔ گرافن خالص و دوپ‌شده با اتم‌های فلزی (Ni، Ti، Cr و Se)

مرضیه چوپانی[۱]، افشار علی حسینی[۱*]، مجید منجمی[۱]، حسین سخایی نیا[۱]

[۱] گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، واحد تهران مرکز، دانشگاه آزاد اسلامی ، تهران، ایران

اطلاعات مقاله

نوع مقاله: پژوهشی

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۲/۱۱
تاریخ ویرایش: ۱۴۰۱/۰۴/۰۸
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۵/۲۳
تاریخ انتشار: ۱۴۰۱/۰۷/۲۵

نویسنده مسئول:
افشار علی حسینی
گروه مهندسی شیمی-بیوتکنولوژی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تهران مرکزی، تهران، ایران.

Email:
Afs.alihosseini@iauctb.ac.ir

چکیده

مقدمه: جنستین یک ایزوفلاون است که به‌عنوان دارو برای متوقف کردن انواع سلول های سرطانی مانند سرطان پستان و پروستات به‌کار می رود. هدف از این تحقیق شبیه سازی مولکولی فرایند جذب سطحی مولکول دارویی جنستین روی گرافن خالص و جنستین بر گرافن دوپ‌شده با اتم های فلـزی Ni، Ti، Se و Cr، برای افزایش بازده جذب مولکول دارویی جنستین-گرافن است.

مواد و روش ها: در این مطالعه با استفاده از نرم افزار HyperChem Professional vol.8.0.10، صفحهٔ گرافن با ابعاد ۴×۴ در مجاورت مولکول جنستین در فاصلهٔ ۱ تا ۵ انگستروم قرار گرفت. از روش نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) برای شبیه‌سازی جذب جنستین-گرافن و برای طراحی بهینهٔ ساختار مولکولی از نرم‌افزار Gaussian vol.09 روش هیبرید B3LYP و مجموعهٔ پایهٔ 6-31G* به دلیل پایدارترین ساختار تا رسیدن به میزان مطلوب استفاده شد.

یافته‌ها: داده‌های به‌دست‌آمده نشان می دهد که انرژی جذب جنستین-گرافن دوپ‌شده با اتم های فلزی Ni، Se، Ti وCr به‌ترتیب ۳۱۸/۱۵۴، ۹۵۴/۰۸۰، ۹۷۲/۷۴۵ و ۱۲۳۶/۱۴۹ کیلوکالری بر مول و شکاف انرژی جنستین-گرافن دوپ‌شده با Cr، Se، Ti و Ni به‌ترتیب ۸۵/۴۲۲، ۹۲/۴۷۶، ۱۰۲/۳۹۶ و ۹۴/۶۹۴ کیلوکالری بر مول است.

بحث و نتیجه‌گیری: نتیجهٔ این تحقیق نشان می‌دهد که حضور اتم Ni دوپ‌شده با گرافن، چگالی بار الکترونی را افزایش می دهد. شکاف انرژی جنستین-گرافن دوپ‌شده با Ni بیانگر واکنش پذیر بودن و چگالی بار الکترونی بالای این ترکیب است و می‌تواند به‌عنوان گزینهٔ مناسبی برای افزایش بازده جذب مولکول دارویی جنستین استفاده شود.

واژه‌های کلیدی: جنستین، جذب سطحی، دوپ‌شده، شکاف انرژی، نظریهٔ تابعی چگالی

استناد: چوپانی، مرضیه؛ علی حسینی، افشار؛ منجمی، مجید؛ سخایی نیا، حسین. مطالعهٔ نظری جذب مولکول دارویی جنستین بر صفحهٔ گرافن خالص و دوپ‌شده با اتم‌های فلزی (Ni، Ti، Cr و Se). مجله علمی دانشگاه علوم پزشکی ایلام، آبان ۱۴۰۱؛۳۰(۴): ۱۰۵-۹۴.

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]
[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]

حق‌مؤلف © نویسندگان

مجله دانشگاه علوم پزشکی ایلام / آبان ۱۴۰۱، دوره ۳۰، شماره ۴، ۱۰۵-۹۴

مقدمه

گرافن با ویژگی‌هایی از قبیل سطح تماس فراوان، سمیت پایین، نسبت بارگیری مناسب (نسبت وزنی مواد دارویی بارگذاری‌شده به گرم حامل)، زیست‌سازگاری، سبکی، نازکی، ساختار لانه‌زنبوری و چگالی بار الکترونی بالا، کاربرد وسیعی در داروسازی به‌عنوان حامل دارو و مهندسی بافت دارد (۳-۱). جنستین یک ایزوفلاون اصلی در محصولات غذایی مبتنی بر سویا است که برای متوقف کردن انواع سلول های سرطانی مانند سرطان پستان و پروستات به‌کار می رود (۴). ایزوفلاون حاصل از سویا می تواند اهداف مختلف مولکولی را تحت تأثیر قرار دهد و بر پاسخ نهایی سلول های سرطانی اثر بگذارد (۹-۵). با استفاده از روش های آنالیز دستگاهی ازجمله طیف سنج جرمی و کروماتوگرافی مایع می توان خصوصیات جنستین و توانایی انتقال دارو را مطالعه کرد (۱۴-۱۰). در ساختار گرافن، هر اتم کربن با سه اتم کربن دیگر پیوند برقرار می‌کند و اوربیتال خالی در گرافن مکان مناسبی برای پیوند با گروه های عاملی است. جنستین با فرمول مولکولی C15H10O5 و داشتن اتم های هیدروژن و اکسیژن و حلقهٔ آروماتیک، قابلیت برقراری برهم‌کنش قوی با صفحهٔ گرافن را دارد که برای واکنش پذیری بیشتر، صفحهٔ گرافن را با اتم های عناصر Ni، Ti، Cr و Se دوپ می کنند (۱۵). پژوهشگران با استفاده از روش های تئوری و تجربی، عملکرد گرافن به‌تنهایی و استخلاف آن با نانوذرات را در جهت جذب مولکول های دارویی ارزیابی کرده‌اند. کاویتا و همکاران اکسیدگرافن را با پلی (۲- (دی اتیل آمینو- اتیل متاکریات)) (PDEA) عامل‌دار نمودند و برای رهایش داروی کمپتوتسین استفاده کردند. آنان دریافتند سامانهٔ انتقال دارو از نظر بارگذاری و فعالیت زیستی دارو در وضعیت مناسبی قرار دارد (۱۶). تان و همکاران گرافن را به‌عنوان حامل دارویی بر اساس هیدروکسی پروپیل-بتاسیکلودکسترین (HP- β-CD) و اکسید گرافن کربوکسیله‌شده (GO-COOH) برای داروی ضدسرطان پاکلی تاکسل استفاده کردند. نتایج تحقیق نشان داد، داروی پاکلی تاکسل با موفقیت در نانوکره GO-COO- HB-CD با قطر متوسط ۱۰۰ نانومتر جذب می‌شود و حلالیت نانوذرات بارگذاری‌شده افزایش می یابد (۱۷). زای و همکاران اکسید گرافن اصلاح‌شده با پپتید پروتامین سولفات و سدیم آلژینات را برای بارگذاری داروی ضدسرطان دوکسوروبیسین به‌کار بردند. نتایج تحقیقات آنان نشان داد که نانوکامپوزیت GO- PRM/SA-DOX به علت وجود اکسیژن فعال بر سطح اکسید گرافن، سمیت سلولی مناسبی برای سلول های سرطانی از خود نشان می دهد (۱۸). با توجه به ماهیت خنثی بودن، زیست‌سازگاری گرافن و تعامل آن با سیستم های زنده، آثار نامطلوبی در شرایط زندگی آن ها ایجاد نمی کند و اطلاعات کمی در رابطه با اثر طولانی‌مدت گرافن بر سلامت انسان موجود است (۲۰-۱۹).

درجهٔ سمیت گرافن به عواملی چون مورفولوژی، بار و تغییرات سطحی، خلوص و انباشتگی و انتخاب ردهٔ سلولی بستگی دارد (۲۱). کومار و همکاران تأثیر عناصر گروه پلاتین، روتنیوم، پالادیوم، اسمیم، ایریدیوم، پلاتینوم و رودیم بر گرافن و محاسبهٔ انرژی پایداری و شکاف انرژی را بررسی کردند. نتایج به‌دست‌آمده از تحقیق آنان نشان داد که دوپ کردن گرافن با عناصر یادشده خصوصیات ساختاری نوری آن را افزایش می دهد و پیوند حاصل از نوع کووالانسی است (۲۲). جیامینگ و همکاران با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی (DFT)، جذب مولکول گازهای CO2، NO، NO2 و SO2 روی گرافن دوپ‌شده با اتم فلزات واسطه (Fe، Ni، Co و Cu) را بررسی نمودند. نتایج تحقیقات آنان نشان داد که گرافن دوپ‌شده با اتم های Fe مناسب‌ترین میزان جذب مولکول های گاز (NO2 (NO2 / Fe-MG) در کمترین فاصلهٔ میان گرافن-مولکول گاز را نشان می‌دهد (۲۳). العتیبی و همکاران محاسبات نظری طیف‌سنجی و مکانیک کوانتومی را برای چهار ترکیب فعال فلاونوئید با

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]

[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]

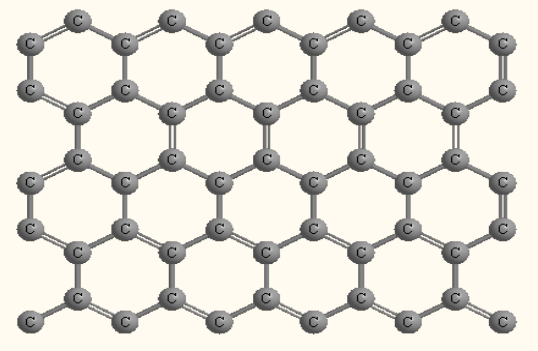
[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]
[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]

خاصیت دارویی (جنستین، آپیژنین، بایکالین و فیستین) انجام دادند. نتایج تحقیقشان نشان داد که انرژی جذب جنستین-گرافن بیشترین مقدار و انرژی جذب گرافن-بایکالین کمترین مقدار است (۲۴). اسرافیلی و ابراهیمی جذب مولکول هیدروژن را بر صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم های Ni و N انجام دادند. نتایج تحقیقات آنان نشان داد که اتم Ni به‌طور مؤثری با اتم های N دوپ‌شده در بستر گرافنی برهم‌کنش می‌دهد (۲۵).

نظریهٔ تابعی چگالی از روش های نیرومند در محاسبات کوانتومی است که به‌طور گسترده در مدل سازی ساختارهای سطحی و ویژگی های مغناطیسی در جذب اتم های فلزی روی صفحهٔ گرافن استفاده می‌شود (۲۷، ۲۶). هدف اصلی از انجام این پژوهش مطالعهٔ نظری جذب سطحی مادهٔ دارویی جنستین بر گرافن خالص و گرافن دوپ‌شده با اتم های Ni، Ti، Cr و Se، با استفاده از محاسبات کوانتومی و تخمین انرژی جذب و شکاف انرژی ساختار جنستین-گرافن است. با توجه به اینکه مطالعات اندکی دربارهٔ جذب مولکول جنستین به‌عنوان مادهٔ دارویی روی صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم های Ni، Ti، Se و Cr انجام‌شده است؛ بنابراین، نوآوری در تحقیق حاضر را می‌توان به تأثیر گرافن دوپ‌شده با اتم های فلزی یادشده بر پایهٔ نظریه تابعی چگالی در جذب مولکول جنستین و برتری آن نسبت به روش هارتری فاک (HF) (که مبتنی بر استفاده از تابع موج است) نسبت داد.

مواد و روش ها

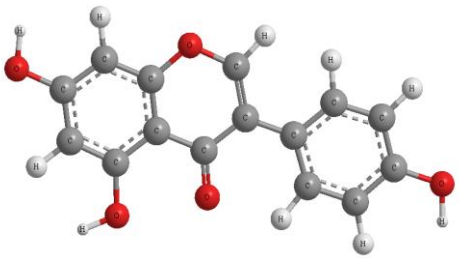
در تحقیق حاضر از نرم‌افزارهای Gaussian vol.09، Bio3D و HyperChem Professional vol.8.0.10 برای طراحی شبکهٔ ساختاری گرافن، مولکول جنستین با فرمول مولکولی C15H10O5 چگالی بار الکترون و محاسبهٔ انرژی‌های جذب و شکاف و تعیین فاصلهٔ تعادلی استفاده شد. صفحهٔ گرافن مطابق شکل شمارهٔ ۱، با ابعاد ۴×۴ در مجاورت مولکول جنستین مطابق شکل شمارهٔ ۲، در فاصلهٔ ۱ تا ۵ انگستروم قرار گرفت و ساختار سه‌بعدی



شکل شمارهٔ ۱. فرمول ساختاری صفحهٔ گرافن خالص با ابعاد ۴×۴

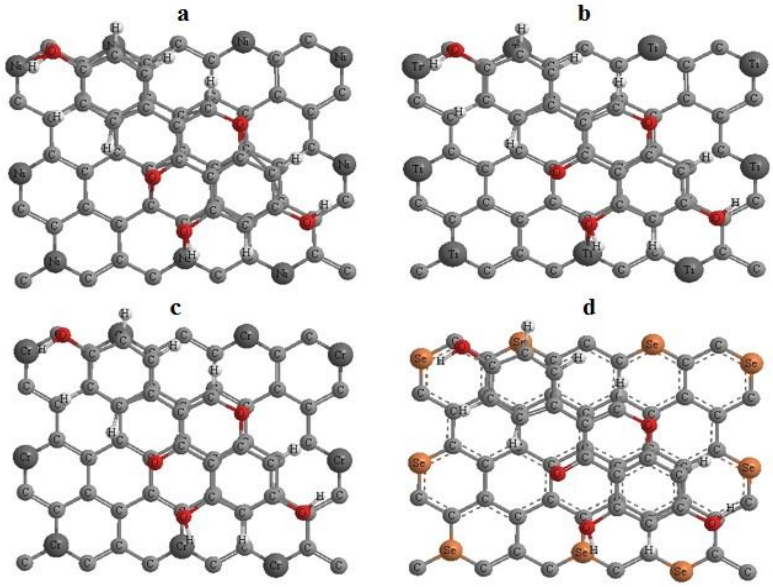
جنستین-گرافن برای تغییر فاصلهٔ میان دو مولکول در نرم افزار ChemBio3D شبیه‌سازی گردید. از روش نظریهٔ تابعی چگالی و برتری آن نسبت به هارتری فاک برای شبیه‌سازی جذب جنستین-گرافن استفاده شد. برای طراحی بهینهٔ ساختار مولکولی از نرم‌افزار Gaussian vol.09 روش هیبرید B3LYP و مجموعهٔ پایهٔ 6-31G* به دلیل پایدارترین ساختار تا رسیدن به میزان مطلوب استفاده گردید (۲۹، ۲۸). پس از بهینه شدن ساختار مولکولی، بر اساس معادلهٔ شمارهٔ ۱، میزان انرژی کل جذب مولکول جنستین بر گرافن خالص به‌دست آمد.

در صفحهٔ گرافن، به‌جای ۹ اتم کربن در هر مرحله، به‌ترتیب اتم های عناصر Ni، Ti، Cr و Se قرار گرفت. با توجه به اینکه اتم های یادشده در دستهٔ عناصر واسطه قرار دارند، به علت تراکم الکترونی در اوربیتال d، مناسب ترین جذب ممکن را ایجاد می کنند. اتم های فلزی در موقعیت کریستالوگرافی ijk (110) روی گرافن دوپ شدند؛ سپس مولکول جنستین در جهت موازی با صفحهٔ گرافن، در راستای محور X مطابق شکل شمارهٔ ۳ به جاذب نزدیک گردید و



شکل شمارهٔ ۲. فرمول ساختاری مولکول جنستین

مجله دانشگاه علوم پزشکی ایلام /آبان ۱۴۰۱، دوره ۳۰، شماره ۴، ۱۰۵-۹۴



شکل شمارهٔ ۳. ساختار و موقعیت جذب مولکول داروی جنستین روی صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم‌های فلزی a) Ni، b) Ti، c) Cr و d) Se

بر اساس محاسبات به‌دست‌آمده از برنامهٔ گوسین با استفاده از معادلات زیر، انرژی جذب در مراحل مختلف به‌دست آمد:

$$E_{ad\,(Ge\ on\ G)} = E_{Ge-G} - (E_G + E_{Ge}) \quad (1)$$

E_{Ge-G} : انرژی کل حاصل از واکنش گرافن با مولکول جنستین

E_{Ge}: انرژی کل یک مولکول گرافن

E_G: انرژی کل گرافن خالص

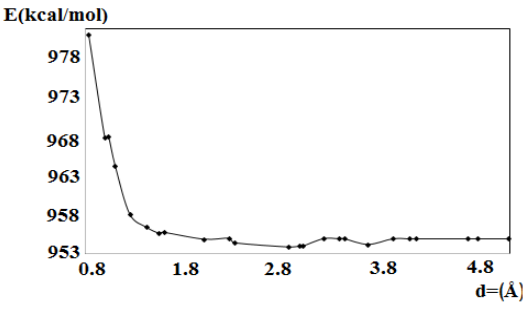
در صفحهٔ گرافن، به‌جای ۹ اتم کربن در هر مرحله، به‌ترتیب اتم‌های عناصر Ni، Ti، Cr و Se قرار گرفت. با توجه به اینکه اتم‌های یادشده در دستهٔ عناصر واسطه قرار دارند، به علت تراکم الکترونی در اوربیتال d، مناسب‌ترین جذب ممکن را ایجاد می‌کنند. اتم‌های فلزی در موقعیت کریستالوگرافی ijk (110) روی گرافن دوپ شدند؛ سپس مولکول جنستین در جهت موازی با صفحهٔ گرافن، در راستای محور X مطابق شکل شمارهٔ ۳ به جاذب نزدیک گردید و بر اساس محاسبات به‌دست‌آمده از برنامهٔ گوسین با استفاده از معادلات زیر، انرژی جذب در مراحل مختلف به‌دست آمد:

$$E_{ad\,(Ge\ on\ Ni-G)} = E_{Ge-Ni-G} - (E_{Ni-G} + E_{Ge}) \quad (2)$$
$$E_{ad\,(Ge\ on\ Cr-G)} = E_{Ge-Cr-G} - (E_{Cr-G} + E_{Ge}) \quad (3)$$
$$E_{ad\,(Ge\ on\ Ti-G)} = E_{Ge-Ti-G} - (E_{Ti-G} + E_{Ge}) \quad (4)$$
$$E_{ad\,(Ge\ on\ Se-G)} = E_{Ge-Se-G} - (E_{Se-G} + E_{Ge}) \quad (5)$$

که در این روابط، $E_{Ge-Ni-G}$، E_{e-Cr-G}، E_{Ge-Ti-} و $E_{Ge-Se-G}$ انرژی‌های کلی حاصل از واکنش مولکول جنستین روی صفحات گرافن دوپ‌شده با عناصر Ni، Cr، Ti و Se است.

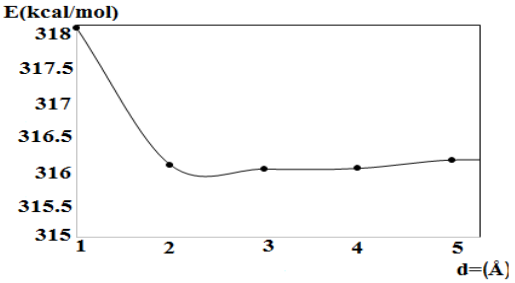
یافته ها

جذب مولکول جنستین روی گرافن خالص: مولکول جنستین توسط نرم‌افزار ChemBio3D روی صفحهٔ گرافن خالص قرار گرفت و با استفاده از معادلهٔ شمارهٔ ۱، در فاصلهٔ بین مولکول و صفحهٔ گرافن خالص (۱ تا ۵ انگستروم) مقدار انرژی کل جذب محاسبه شد. شکل شمارهٔ ۴ انرژی جذب مولکول جنستین-گرافن خالص در این فاصله را نمایش می دهد. همان گونه که شکل



شکل شمارهٔ ۴. انرژی جذب مولکول داروی جنستین و صفحهٔ گرافن خالص بر حسب فاصله (انگستروم)

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]
[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]



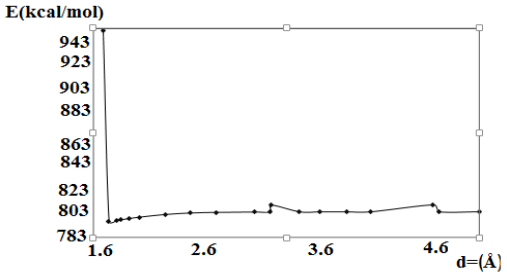
شکل شمارهٔ ۵. انرژی جذب مولکول داروی جنستین و صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم‌های Ni برحسب فاصله (انگستروم)

شمارهٔ ۴ نشان می دهد، در فاصلهٔ ۰/۸ انگستروم، میزان انرژی جذب میان مولکول جنستین-گرافن معادل ۹۷۸ کیلوکالری بر مول و در فاصلهٔ تعادلی ۲/۸۷۴ انگستروم، معادل ۹۵۳ کیلوکالری بر مول است.

انرژی جذب مولکول جنستین-گرافن دوپ‌شده با Ni: برای مطالعهٔ انرژی جذب گرافن دوپ‌شده با اتم های فلزی در جذب جنستین، ۹ اتم کربن در صفحهٔ گرافن با ۹ اتم Ni جایگزین شد و مولکول جنستین در فاصلهٔ ۱ تا ۵ انگستروم از صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم Ni قرار گرفت. شکل شمارهٔ ۵ انرژی جذب مولکول جنستین بر صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با Ni در این فاصله را نشان می دهد. همان گونه که از شکل شمارهٔ ۵ پیداست، انرژی حاصل از جذب جنستین-گرافن دوپ‌شده با Ni در فاصلهٔ ۱ تا ۲ انگستروم، ۳۱۸ تا ۳۱۶ کیلوکالری بر مول است.

انرژی جذب جنستین بر روی گرافن دوپ‌شده با Ti: برای مطالعهٔ انرژی جذب جنستین-گرافن دوپ‌شده با Ti، ۹ اتم کربن در صفحهٔ گرافن با موقعیت یادشده با ۹ اتم Ti جایگزین شد. انرژی جذب مولکول جنستین-گرافن در فاصلهٔ ۱ تا ۵ انگستروم از صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم Ti محاسبه گردید.

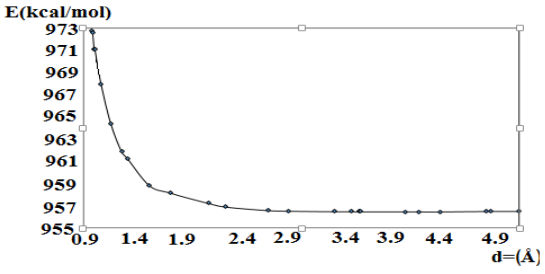
همان گونه که در شکل شمارهٔ ۶ مشاهده می شود، در فاصلهٔ تعادلی ۱/۶ انگستروم، انرژی جذب از ۹۴۳ به ۷۸۳ کیلوکالری بر مول کاهش می یابد. در کمتر از فاصلهٔ تعادلی به‌سبب نیروی دافعهٔ الکترونی میان مولکول جنستین و گرافن دوپ‌شده با Ti، انرژی جذب ۹۴۳ کیلوکالری بر مول بیشترین مقدار را دارد؛ به عبارتی،



شکل شمارهٔ ۶. انرژی جذب مولکول داروی جنستین و صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم‌های Ti برحسب فاصله (انگستروم)

انرژی جذب جنستین روی گرافن- Ti دوپ‌شده ۱۶۰- کیلوکالری بر مول است.

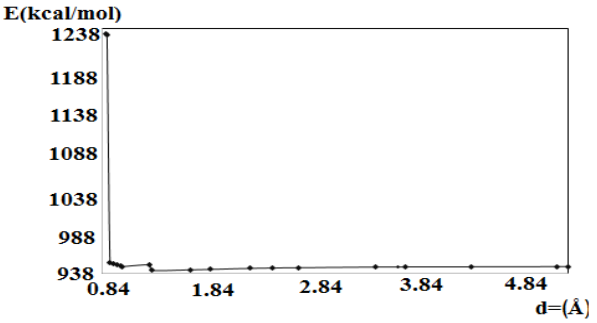
انرژی جذب مولکول جنستین روی گرافن دوپ‌شده با اتم Se: در این بخش از تحقیق، ۹ اتم کربن در صفحهٔ گرافن با ۹ اتم Se جایگزین گردید و مولکول جنستین در فواصل (۱ تا ۵ انگستروم) از صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم Se قرار گرفت. شکل شمارهٔ ۷ انرژی جذب مولکول جنستین بر صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم Se در فاصلهٔ ۱ تا ۵ انگستروم را نمایش می دهد. همان گونه که در این شکل آشکار است، با افزایش فاصلهٔ مولکول جنستین-گرافن دوپ‌شده با Se، میزان انرژی جذب کاهش می‌یابد و به مقدار ۹۵۶/۴۹۸ کیلوکالری بر مول می رسد. بیشترین مقدار انرژی جذب در فاصلهٔ ۰/۸۲ انگستروم، برابر با ۹۷۲/۷۴۵ کیلوکالری بر مول و کمترین مقدار انرژی جذب در فاصلهٔ ۴/۱۷۱ انگستروم، برابر با ۹۵۶/۴۵۷ کیلوکالری بر مول به‌دست آمد که نشان دهندهٔ نیروهای دافعهٔ الکترونی در فاصلهٔ کمتر از فاصلهٔ تعادلی است؛ به عبارتی، انرژی جذب جنستین-گرافن دوپ‌شده



شکل شمارهٔ ۷. انرژی جذب مولکول داروی جنستین و صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم‌های Se برحسب فاصله (انگستروم)

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]
[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]

مجله دانشگاه علوم پزشکی ایلام / آبان ۱۴۰۱، دوره ۳۰، شماره ۴، ۱۰۵-۹۴



شکل شمارهٔ ۸ انرژی جذب مولکول داروی جنستین و صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم‌های Cr برحسب فاصله (انگستروم)

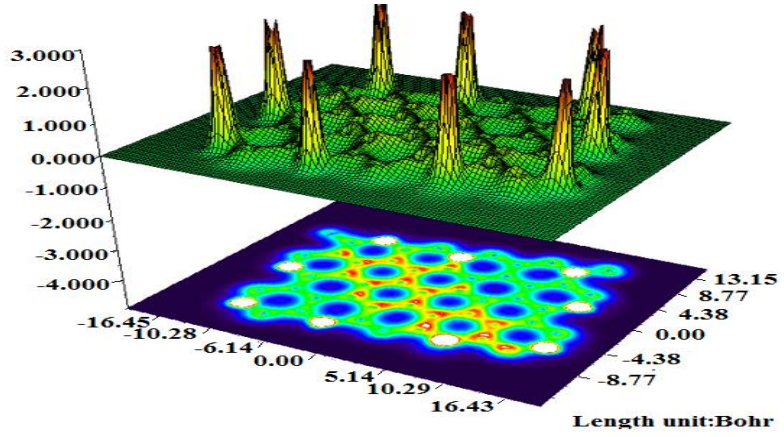
با Se برابر ۱۶/۲۹- کیلوکالری بر مول است.

انرژی جذب مولکول جنستین-گرافن دوپ‌شده با اتم Cr. برای مطالعهٔ انرژی جذب جنستین-گرافن دوپ‌شده با اتم Cr، ۹ اتم کربن در صفحهٔ گرافن با ۹ اتم Cr جایگزین گردید و مولکول جنستین در فاصلهٔ ۱ تا ۵ انگستروم از صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم Cr قرار گرفت. همان‌گونه که شکل شمارهٔ ۸ نشان می دهد، در فاصلهٔ ۰/۸۷۶ انگستروم، بیشترین میزان انرژی جذب ۱۲۳۸ کیلوکالری بر مول است که نشان دهندهٔ وجود جذب واندروالسی قوی میان اتم های مولکول جنستین و گرافن دوپ‌شده با Cr است و پس از این فاصله، انرژی جذب کاهش چشمگیری داشت و در فاصلهٔ ۰/۹۱۴ انگستروم، به ۹۵۱/۶۱۹ کیلوکالری بر مول رسید؛ به عبارتی، انرژی حاصل از جذب جنستین-گرافن دوپ‌شده با Cr معادل ۲۸۶/۳۸۱- کیلوکالری بر مول است.

بحث و نتیجه‌گیری

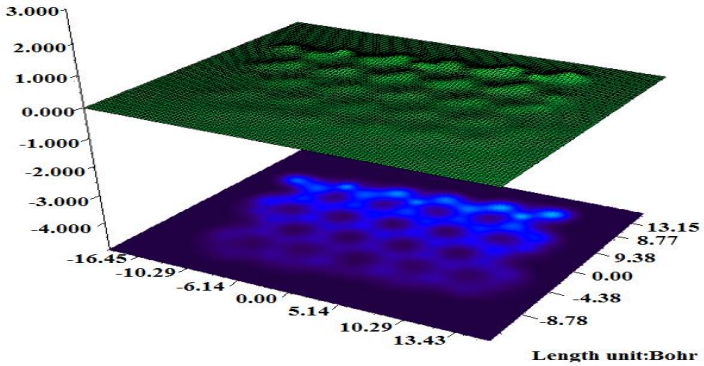
همان‌گونه که داده‌های حاصل از تحقیق نشان می‌دهد، انرژی حاصل از جذب جنستین و گرافن دوپ‌شده با اتم فلزی در بعضی از اتم‌ها پایین و در بعضی از آن‌ها به نسبت بیشتر است. با توجه به اینکه انرژی جذب پایین نشان از جذب سطحی دارو روی جاذب و به‌تبع آن، رهاسازی آسان در محل هدف است؛ بنابراین، فاصلهٔ تعادلی مولکول جنستین بر گرافن دوپ‌شده با اتم Ni در فاصلهٔ ۱ تا ۲ انگستروم و انرژی جذب ۳۱۸ تا ۳۱۶ کیلوکالری بر مول مناسب‌ترین حالت برای دوپ کردن گرافن است. با مقایسهٔ شکل‌های شمارهٔ ۹ و ۱۰ می توان دریافت که با افزایش فاصله میان جاذب و جذب شونده (جنستین و صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم Ni)، میزان انتقال الکترون کاهش می‌یابد (۵/۱۱۲ انگستروم) و با کاهش فاصله (۱/۱۸۰ انگستروم) با توجه به پیک های سبزرنگ موجود روی مولکول جنستین (شکل شمارهٔ ۹)، میزان انتقال الکترون به علت ایجاد جذب نیرومند میان جاذب و جذب شونده، افزایش می‌یابد.

محاسبهٔ شکاف انرژی (HOMO-LUMO): شکاف انرژی برای مولکول جنستین-گرافن خالص و جنستین-گرافن دوپ‌شده با اتم های فلزی Se، Cr، Ti و Ni در فاصلهٔ ۱ تا ۵ انگستروم محاسبه گردید. شکل شمارهٔ ۱۱ مقایسهٔ این مقادیر را نمایش می دهد.



شکل شمارهٔ ۹. رابطهٔ انتقال الکترون جنستین-صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم Ni در فاصلهٔ ۱/۱۸۰ (انگستروم)

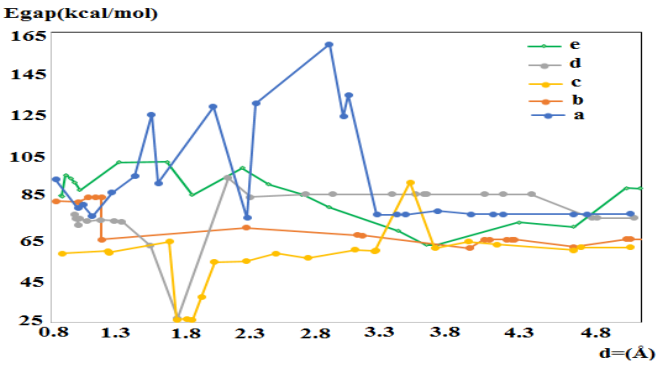
[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]
[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]



شکل شمارهٔ ۱۰. رابطهٔ انتقال الکترون جنستین-صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم Ni در فاصلهٔ ۵/۱۱۲ (انگستروم)

همان‌گونه که در شکل شمارهٔ ۱۱ مشاهده می شود، بیشترین مقدار شکاف انرژی در گرافن خالص-جنستین برابر با ۱۵۹/۱۴۸ کیلوکالری بر مول است. برای اتم های Se، Cr، Ti و Ni دوپ‌شده با گرافن، بیشترین مقدار شکاف انرژی به‌ترتیب برابر با ۸۵/۴۲۲، ۹۲/۴۷۶، ۱۰۲/۳۹۶ و ۹۴/۶۹۱ کیلوکالری بر مول است. با توجه به شکاف انرژی در هر مرحله و مقایسهٔ آن ها با انرژی جذب می توان نتیجه گرفت که دوپ کردن گرافن با Ni انرژی جذب کمتری در مقایسه با سایر اتم های دوپ‌شده با گرافن دارد؛ همچنین شکاف انرژی به‌دست‌آمده در این حالت نشان می دهد که با افزایش فاصله، شکاف انرژی افزایش‌یافته است، به‌گونه‌ای که شکاف انرژی جنستین-گرافن خالص از شکاف انرژی جنستین-گرافن با اتم‌های دوپ‌شده فلزی بیشتر است.

جدول شمارهٔ ۱ شکاف انرژی جذب جنستین-گرافن خالص و جنستین-گرافن دوپ‌شده با اتم های فلزی با تغییر فاصله را نمایش می دهد (محاسبات با استفاده از نرم‌افزار گوسین به‌دست‌آمده است) و مقایسهٔ شکاف انرژی ترکیب های فعال فلاونوئید دارویی و گرافن خالص در جدول شمارهٔ ۲ آمده است (۲۳).



شکل شمارهٔ ۱۱. شکاف انرژی مولکول جنستین و صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم‌های a) G-Ge، b) Ni-G-Ge، c) Ti-G-Ge

d) Se-G-Ge و e) Cr-G-Ge

جدول شمارهٔ ۱. مقادیر انرژی جذب و شکاف انرژی مولکول جنستین-گرافن خالص و جنستین-گرافن دوپ‌شده با اتم‌های فلزی (Ni، Ti، Cr و Se)

System	de(Å)	Ead(kcal/mol)	Egap(kcal/mol)
Genistein-PG	۲/۲۶۵	۹۵۴/۹۸۴	۷۵/۲۶۳
Genistein-NiG	۱/۱۸۰	۳۱۸/۱۵۳	۶۰/۶۲۹
Genistein-TiG	۱/۸۵۴	۷۹۷/۴۸۰	۲۵/۸۱۵
Genistein-CrG	۳/۶۶۹	۹۴۶/۷۲۵	۶۱/۹۴۷
Genistein-SeG	۱/۷۴۴	۹۵۸/۱۵۴	۴۵/۲۵۲

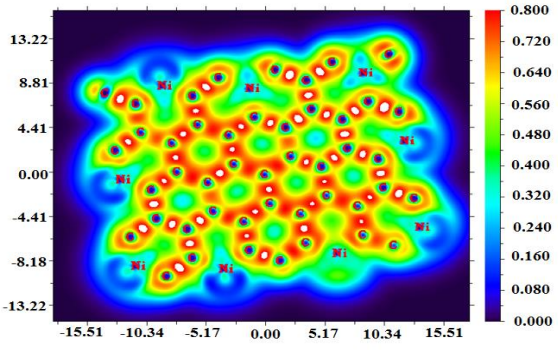
[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]
[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]

مجله دانشگاه علوم پزشکی ایلام / آبان ۱۴۰۱، دوره ۳۰، شماره ۴، ۱۰۵-۹۴

جدول شمارهٔ ۲. مقایسهٔ شکاف انرژی ترکیب های فعال دارویی و گرافن خالص (۲۳)

System	Egap(kcal/mol)
Genistein-PG	۲/۴۷۴
Apigenin-PG	۲/۷۴۱
Baicalein-PG	۲/۰۶۲
Fisetin-PG	۱/۹۸۶

به‌طورکلی، واکنش‌پذیری شیمیایی با کاهش انرژی های LUMO و افزایش انرژی های HOMO بالا می رود؛ به عبارتی، گونه های شیمیایی نرم تر از گونه های سخت تر واکنش‌پذیرترند (۳۳). با توجه به مطالب ذکرشده، گرافن دوپ‌شده با Ni شکاف انرژی کمتر و واکنش‌پذیری بیشتری دارد و پیوند Ni-O و Ni-H نسبت به گرافن خالص، افزایش طول داشت که نشان‌دهندهٔ برهم‌کنش مناسب میان دو مولکول است. شکل شمارهٔ ۱۲ توپوگرافی دوبعدی گرافن دوپ‌شده با Ni در فاصلهٔ ۱/۱۸ انگستروم را نشان می دهد. همان گونه که مشاهده می شود، نقاط نزدیک هستهٔ اتم های کربن قدرت الکترونی بالا (نقاط قرمزرنگ) و نقاط نارنجی‌رنگ (قرمز مایل به نارنجی) قدرت الکتـــرونی کمتری نسبت به مناطق قرمزرنگ (حدود ۰/۹-۰/۸) دارند. پیوند C-C دارای خاصیت کووالانسی بسیار و چگالی الکترون بالا است؛ اما در نواحی‌ای که اتم‌های Ni وجود دارد (نقاط آبی‌رنگ)، قدرت الکترونی اندک و در فاصلهٔ تعادلی از مولکول جنستین ایجادشده است. شکل شمارهٔ ۱۳ توپوگرافی



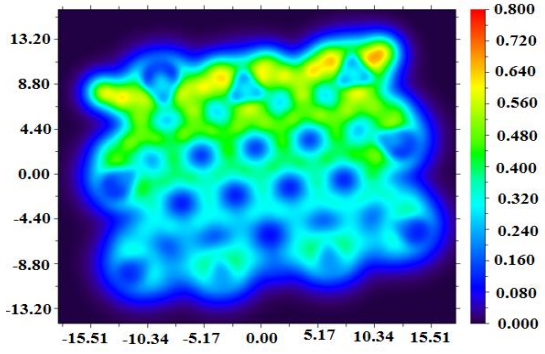
شکل شمارهٔ ۱۲. توپوگرافی دوبعدی جذب مولکول جنستین بر صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم‌های Ni در فاصلهٔ ۱/۱۸۰ (انگستروم)

دوبعدی Ni دوپ‌شده بر صفحهٔ گرافن در فاصلهٔ ۵/۱۱۲ انگستروم را نشان می دهد.

همان گونه که در تصویر مشاهده می شود، چگالی الکترون ضعیفی در کل صفحه وجود دارد و تقریباً همهٔ نقاط به رنگ آبی و سبز ایجادشده است که نشان دهندهٔ جذب ضعیف میان اتم ها در فاصلهٔ ۵/۱۱۲ انگستروم است و مولکول جنستین از صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم Ni میزان جذب کمتری صورت گرفته است. از مقایسهٔ توپوگرافی LOL می توان نتیجه گرفت که در فاصله های نزدیک مولکول جنستین و صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم های Ni، چگالی الکترون افزایش و قدرت جذب بهتری صورت گرفته است (۳۴، ۳۵).

مقایسهٔ طول و زاویهٔ پیوند میان مولکول جنستین-گرافن خالص و جنستین-گرافن دوپ‌شده با اتم های فلزی: جدول شمارهٔ ۳ طول پیوند جنستین-گرافن را پیش و پس از دوپ شدن با اتم های فلز Se، Cr، Ti و Ni نشان می‌دهد (مقادیر با استفاده از نرم‌افزار ChemBio3D به‌دست‌آمده است). همان‌گونه که مشاهده می‌شود، گرافن دوپ‌شده با اتم Ni نسبت به دیگر انواع اتم‌ها، در طول و زاویهٔ پیوند مؤثرتر است که تغییر طول پیوند در برهم‌کنش میان اتم اکسیژن گروه هیدروکسیل مولکول جنستین و اتم Ni دوپ‌شده در صفحهٔ گرافن در جدول شمارهٔ ۴ آمده است.

نتایج حاصل از محاسبهٔ انرژی جذب گرافن خالص نشان



شکل شمارهٔ ۱۳. توپوگرافی دوبعدی جذب مولکول جنستین روی صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم‌های Ni در فاصلهٔ ۵/۱۱۲ (انگستروم)

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]
[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]

جدول شمارهٔ ۳. طول پیوند و زاویهٔ پیوند جنستین–گرافن خالص و جنستین-گرافن دوپ‌شده با اتم های فلزی (Ni، Ti، Cr و Se)

نام جذب	زاویهٔ پیوند (درجه)	طول پیوند در فاصلهٔ تقریبی ۱ انگستروم
جنستین-گرافن خالص	۱۱۶/۹	C-H:۰/۱۶۹ ؛C-O:۱/۷۱۷
جنستین –گرافن دوپ‌شده با Ni	۱۴۴/۶	Ni-H:۳/۵۴۰ ؛Ni-O:۲/۶۳۶
جنستین-گرافن دوپ‌شده با Ti	۱۱۸	Ti-H:۱/۰۸۸ ؛Ti-O:۱/۸۲۸
جنستین-گرافن دوپ‌شده با Cr	۱۱۸/۶	Cr-H:۱/۱۰۹ ؛Cr-O:۰/۹۲۷
جنستین-گرافن دوپ‌شده با Se	۱۱۵/۹	Se-H:۱/۱۸۳ ؛Se-O:۱/۸۹۰

داد که انرژی جذب جنستین–گرافن خالص در فاصلهٔ تعادلی ۲/۸۷۴ انگستروم معادل ۲۵- کیلوکالری بر مول است.

در پژوهش العتیبی و همکاران روی جذب جنستین–گرافن، بیشترین میزان انرژی جذب بدون در نظر گرفتن فاصله، ۴/۰۵۹- کیلوکالری بر مول به‌دست آمد که در مقایسه با مولکول‌های دارای حلقهٔ فنلی ازجمله آپیژنین و بایکالین و فیستین بیشتر است (۲۳)؛ همچنین محاسبات انرژی جذب مولکول گرافن دوپ‌شده با Ni نشان داد که افزایش فاصلهٔ جنستین–گرافن اصلاح‌شده با Ni (بیشتر از ۲ انگستروم) تأثیر چندانی بر انرژی جذب ندارد. علاوه بر این، مقدار انرژی جذب در رابطه با جذب جنستین–گرافن خالص به‌مراتب پایین تر است و به‌نوعی جذب به سوی جذب فیزیکی تمایل دارد. مقایسهٔ مقدار انرژی جذب جنستین–گرافن دوپ‌شده با Ti و انرژی جذب جنستین–گرافن دوپ‌شده با Ni نشان دهندهٔ تمایل جذب به سوی شیمیایی است. با افزایش فاصله از ۱/۸۵۴ انگستروم، میزان انرژی جذب به علت تغییر نداشتن طول پیوند، ثابت و سیستم پایدار است. نتایج تحقیق چو و همکاران روی جذب مولکول H بر گرافن دوپ‌شده با اتم Ti نشان می دهد که گرافن دوپ‌شده با Ti قابلیت جذب ۸ اتم H را دارد که H به‌صورت مولکولی روی صفحهٔ گرافنTi جذب می شود؛ اما انتقال بار اندکی میان H و Ti انجام می گیرد. انرژی جذب حدود ۵/۹۹۵- کیلوکالری بر مول به‌دست آمد که نشان می دهد اتم Ti تأثیری بر جذب مولکول H نداشته است و گرافن به‌طور خالص می تواند جذب مؤثرتری داشته باشد (۳۰). نتایج تحقیق زو و همکاران در جذب مولکول H2CO روی صفحهٔ گرافن نشان می دهد که در اثر فرایند جذب، اتم اکسیژن H2CO نزدیک به اتم های Cr در صفحهٔ گرافن دوپ‌شده، تغییری در ساختار گرافن ایجاد نمی کند و تنها میـزان طول پیوند میان اتم Cr-C تغییر می یابد (۳۲). محاسبات حاصل از تحقیق حاضر نشان داد که بیشترین میزان انرژی جذب مولکول جنستین بر صفحهٔ گرافن دوپ‌شده با اتم های Cr، Se و Ti تقریباً نزدیک به هم و در حدود ۹۵۰-۹۸۱ کیلوکالری بر مول است، درصورتی‌که برای اتم های Ni دوپ‌شده با گرافن در حدود ۳۱۸ کیلوکالری بر مول بود که نشان دهندهٔ واکنش‌پذیر بودن Ni در مقایسه با سایر اتم ها است. پس از اتم Ni، اتم Ti به نسبت دو اتم Cr و Se، برای جذب مولکول جنستین مناسب است. علاوه بر این، در پژوهش حاضر، نظر به اهمیت اتم Ni در فرایند جذب جنستین،

جدول شمارهٔ ۴. طول پیوند اکسیژن–جنستین در استخلاف گرافن دوپ‌شده با اتم Ni در فاصلهٔ بین ۱ تا ۵ انگستروم

فاصلهٔ تعادلی(Å)	طول پیوند اکسیژن–جنستین (Å)	نوع پیوند
۰/۸۸۸	۰/۸۳۹	Ni-O
۱/۰۴۵	۱/۰۰۳	Ni-O
۲/۷۸۸	۲/۲۵۳	Ni-O
۳/۵۰۹	۳/۱۲۱	Ni-O
۴/۳۹۷	۴/۰۲۷	Ni-O
۵/۳۲۹	۵/۱۱۲	Ni-O

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]
[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]

مجله دانشگاه علوم پزشکی ایلام / آبان ۱۴۰۱، دوره ۳۰، شماره ۴، ۱۰۵-۹۴

نمودار چگالی الکترون جنستین–گرافن دوپ‌شده با Ni در فاصلهٔ ۱/۱۸۰ انگسترم مطابق شکل شمارهٔ ۹ مطالعه شد.

درنهایت، نتایج به‌دست‌آمده از این تحقیق، جاذب گرافن دوپ‌شده با اتم Ni را مناسب ترین جاذب در مقایسه با سایر اتم های دوپ‌شده بر صفحهٔ گرافن، برای جذب داروی جنستین پیشنهاد می‌کند، چرا که نتایج حاصل از تحقیق نشان داد عنصر Ni در مقایسه با سایر عناصر جذب بهتری ایجاد کرده و به دلیل اینکه با دوپ شدن Ni بر روی گرافن داروی جنستین بهتر جذب شده است از این عنصر می توان برای افزایش جذب داروی ضد سرطان جنستین روی ورق گرافن استفاده کرد برای بررسی دقیق تر نیاز است تا تحقیقات بیشتری در زمینه آزمایشگا هی صورت گیرد تا بتوان نتایج به دست آمده داره با قاطعیت بیشتری توصیف کرد.

تشکر و قدردانی

بدین وسیله از همه کسانی که در انجام این تحقیق ما را یاری کردند و از دانشگاه آزاد تهران مرکز برای حمایت هایشان تشکر و قدردانی می گردد.

تعارض منافع

نویسندگان مقاله هیچگونه تعارض منافعی با همدیگر ندارند.

References

1. Stankovich S, Dikin DA, Dommett GH, Kohlhaas KM, Zimney EJ, et al. Graphene-based composite materials. Nature 2006; 442:282-6. doi.org/10. 1038/nature04969.
2. Qiu L, Li Z, Qiao M, Long M, Wang M, et al. Self-assembled pH-responsive hyaluronic acid–g-poly (l-histidine) copolymer micelles for targeted intracellular delivery of doxorubicin. Acta Biomater 2014 ; 10:2024-35. doi.org/10.1016/ j.actbio.2013.12.025.
3. Alihosseini A, Choupani M, Monajjemi M, Sakhaeinia H. Analysis and comparison of metal-doped on graphene-genistein using QM/MM calculations. Rev Fac Ingenier Uni Antioquia 2022 :164-74. doi.org/10.17533/udea.redin. 20210634.
4. Sohrabi N, Alihosseini A, Pirouzfar V, Pedram MZ. Analysis of dynamics targeting CNT-based drug delivery through lung cancer cells: Design, simulation, and computational approach. Membranes 2020; 10:283. doi.org/10.3390/ membranes 10100283.
5. Morales P, Isawi I, Reggio PH. Towards a better understanding of the cannabinoid-related orphan receptors GPR3, GPR6, and GPR12. Drug Metab Rev 2018; 50:74-93. doi.org/10.1080/03602532. 2018.1428616.
6. Barazandeh A, Najafpour GD, Alihosseini A, Kazemi S, Akhondi E. Spectrophotometric Determination of Naproxen Using Chitosan Capped Silver Nanoparticles in Pharmaceutical Formulation. Int J Eng 2021 ; 34:1576-85. doi.org/10.5829/IJE.2021.34.07A.03.
7. Spagnuolo C, Russo GL, Orhan IE, Habtemariam S, Daglia M, et al. Genistein and cancer: current status, challenges, and future directions. Adv Nutr 2015; 6:408-19. doi.org/10.3945/an.114.008052.
8. Ronis MJ. Effects of soy containing diet and isoflavones on cytochrome P450 enzyme expression and activity. Drug Metab Rev 2016; 48:331-41. doi.org/10.1080/03602532.2016.1206562.
9. Ardito F, Di Gioia G, Pellegrino MR, Muzio LL. Genistein as a Potential Anticancer Agent Against Head and Neck Squamous Cell Carcinoma. Curr Top Med Chem 2018 ; 18:174-81. doi.10.2174/ 1568026618666180116122650.
10. Chae HS, Xu R, Won JY, Chin YW, Yim H. Molecular targets of genistein and its related flavonoids to exert anticancer effects. Int J Mol Sci 2019; 20:2420. doi.org/10.3390/ijms 20102420.
11. Zava DT, Duwe G. Estrogenic and antiproliferative properties of genistein and other flavonoids in human breast cancer cells in vitro. Nutr Cancer 1997; 31-40. doi.org/10.1080/016355 89709514498.
12. Han S, Wu H, Li W, Gao P. Protective effects of genistein in homocysteine-induced endothelial cell inflammatory injury. Mol Cell Biochem 2015; 403:43-9. doi.org/10.1007/s11010-015-2335-0.
13. Okazaki K, Okazaki S, Nakamura H, Kitamura Y, Hatayama K, et al. A repeated 28-day oral dose toxicity study of genistein in rats, based on the'Enhanced OECD Test Guideline 407'for screening endocrine-disrupting chemicals. Arch Toxicol 2002; 76:553-9. doi/ 10.1007/s00204-002-0376-0.
14. Friso A, Tomanin R, Salvalaio M, Scarpa M. Genistein reduces glycosaminoglycan levels in a mouse model of mucopolysaccharidosis type II. Br J Pharmacol 2010; 159:1082-91. doi.org/10. 1111/j.1476-5381.2009.00565. x.
15. Sail V, Hadden MK. Notch pathway modulators as anticancer chemotherapeutics. Chem Biol Drug Des 2012; 47:267-80. doi.org/10.1016/B978-0-12-396492-2.00018-7.
16. Kavitha T, Abdi SI, Park SY. pH-sensitive Nanocargo based on smart polymer functionalized graphene oxide for site-specific drug delivery. Phys Chem Chem Phys 2013; 15:5176-85. doi.org/10.1039/C3CP00008G.
17. Tan J, Meng N, Fan Y, Su Y, Zhang M, et al. Hydroxypropyl-β-cyclodextrin–graphene oxide conjugates: Carriers for anti-cancer drugs. Mater Sci Eng C Mater Biol Appl 2016; 61:681-7. doi.org/10.1016/j.msec.2015.12.098.

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]

[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]

[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]

18. Xie M, Zhang F, Liu L, Zhang Y, Li Y, et al. Surface modification of graphene oxide nanosheets by protamine sulfate/sodium alginate for anti-cancer drug delivery application. Appl Sur Sci 2018; 440:853-60. doi.org/10.1016/ j.apsusc.2018.01.175.
19. Madani SY, Mandel A, Seifalian AM. A concise review of carbon nanotube's toxicology. Nano rev 2013; 4:21521. doi.org/10.3402/nano. v4i0.21521.
20. Wang Y, Wu S, Zhao X, Su Z, Du L, et al. In vitro toxicity evaluation of graphene oxide on human RPMI 8226 cells. Biomed Mater Eng 2014; 24:2007-13. doi: 10.3233/BME-141010.
21. Ou L, Song B, Liang H, Liu J, Feng X, et al. Toxicity of graphene-family nanoparticles: a general review of the origins and mechanisms. Part Fibre Toxicol 2016; 13:1-24. doi.org/ 10.1186/s12989-016-0168-y.
22. Kumar S, Sharma S, Karmaker R, Sinha D. DFT study on the structural, optical and electronic properties of platinum group doped graphene. Mater Today Commun 2021; 26:101755. doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101755.
23. Ni J, Quintana M, Song S. Adsorption of small gas molecules on transition metal (Fe, Ni and Co, Cu) doped graphene: A systematic DFT study. Phy Low-dimen Sys Nanostruct 2020; 116: 113768. doi.org/10.1016/j.physe.2019.113768.
24. Al-Otaibi JS, Mary YS, Mary YS, Kaya S, Erkan S. Spectral analysis and DFT investigation of some benzopyran analogues and their self-assemblies with graphene. J Mol Liquid 2020; 317:113924. doi.org/10.1016/j.molliq.2020. 113924.
25. Esrafili M, Nejad Ebrahmi B. A Computational Study about Reduction of Carbon Dioxide by Hydrogen Molecule over Graphene Surface Doped with Ni and N Atoms. Nashrieh Shimi va Mohandesi Shimi Iran. 2021; 39:109-18.
26. Parr RG. Density Functional Theory of Atoms and Molecules. Proceeding of the Third International Congress of Quantum Chemistry Held at Kyoto, Japan. 1979; 3: 5-15. doi: 10.1007/978-94-009-9027-2_2.
27. Karimi P, Sanchooli M. Investigation of Ability of Graphene-Based Nanostructures as Sodium Ion Batteries. Nashrieh Shimi va Mohandesi Shimi Iran. 2020; 38:23-30.
28. Mohammed MH, Ajeel FN, Khudhair AM. Adsorption of gas molecules on graphene nanoflakes and its implication as a gas nanosensor by DFT investigations. Chinese J Physic 2017; 55:1576-82. doi.org/10.1016/j.cjph.2017.05.013.
29. Shameli A, Balali E. The Study of absorption of drug anticancer Chlorambucil on Graphene: A DFT Study. J Quantum Chem Spectroscopy 2018; 8: 73-85.
30. Chu S, Hu L, Hu X, Yang M, Deng J. Titanium-embedded graphene as high-capacity hydrogen-storage media. Int J Hydrog Energy 2011; 36:12324-8. doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.07.015.
31. Aktürk OÜ, Tomak M. Adsorption of RuSex (x= 1–5) cluster on Se-doped graphene: First principle calculations. Appl Surf Sci 2015; 347:808-15. doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.04.124.
32. Zhou Q, Wang C, Fu Z, Tang Y, Zhang H. Adsorption of formaldehyde molecule on Stone–Wales defected graphene doped with Cr, Mn, and Co: a theoretical study. Comput Mater Sci 2014; 83:398-402. doi.org/10.1016/j.commatsci.2013. 11.036.
33. Farshad S, Darvish Ganji M. Theoretical study of interaction between aspirine drug and Al-soped graphene nanostructure toward designing of suitable nanocarrier for drug delivery. Med Sci J Islamic Azad Uni Tehran 2020; 30:141-54. doi.org 10.29252/iau.30.2.141.
34. Liang J, Li P, Zhao X, Liu Z, Fan Q, et al. Distinct interface behaviors of Ni (II) on graphene oxide and oxidized carbon nanotubes triggered by different topological aggregations. Nanoscale 2018; 10:1383-93. doi:10.1039/C7NR07966D.
35. Koumpouras K, Larsson JA. Distinguishing between chemical bonding and physical binding using electron localization function (ELF). J Phys Condens Matter 2020; 32:315502. doi.org/ 10.1088/1361-648X/ab7fd8.

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-10]
[DOR: 20.1001.1.15634728.1401.30.4.4.9]
[DOI: 10.52547/sjimu.30.4.94]