

Физическая сорбция молекулы сульфорофана и нанотрубки CNT (8,0-10)

Международный государственный экологический институт имени А.Д. Сахарова Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь

В связи с развитием нанотехнологий сегодня можно говорить о появлении нового направления – наномедицины. Благодаря нанотехнологиям в дальнейшем возможно создание роботов-врачей, которые будут способны проводить хирургические операции на жизненно важных органах, а также капсул, заполненных лекарственным препаратом, которые способны доставлять его в пораженные ткани или органы.

Сульфорофан (SFR) – органическое соединение растительного происхождения, обладающее противоопухолевым и антибактериальным свойствами. Предшественник сульфорофана – глюкорафанин присутствует в овощах семейства капустных, таких как брокколи, белая капуста, цветная капуста, кольраби и др. Наиболее богаты глюкорафанином побеги брокколи и цветной капусты. При механическом повреждении этих растений (что происходит, например, и при пережаривании) растительный фермент мирозиназа превращает глюкорафанин в сульфорофан, который защищает растение от инфекции.

Целью работы является оценка возможности образования комплекса между углеродной нанотрубкой CNT (8,0-10) и молекулой сульфорофана.

В настоящее время любое систематическое исследование в химии базируется, прежде всего, на какой-либо теоретической модели, позволяющей, по крайней мере, полуколичественно или качественно описывать характеристики вещества.

Квантово-химическое моделирование пространственного и электронного строения соединений, их химических и физико-химических свойств, а также изучение возможности образования атомно-молекулярных структур и их объединений является эффективным методом исследований.

Информативность квантово-химических расчетов в сравнении с экспериментальными методами изучения строения молекул также гораз-

до выше. Действительно, в одном-двух расчетах можно сразу получить данные о геометрии молекулы, термодинамических функциях состояния, энергиях ионизации, дипольном моменте, распределении электронной плотности, электронном спектре и т.п. Ни один из экспериментальных методов не позволяет получить такого широкого набора данных. Более того, некоторые рассчитываемые свойства молекул (порядки связей, свободные ковалентности, свойства переходных состояний) сложно определить экспериментально, хотя они оказываются важными для описания поведения молекул в химических реакциях.

В работе выполнены расчеты равновесных геометрий соединений SFR и комплекса CNT (8,0-10)/SFR используя теорию функционала плотности CAM-B3LYP/6-311+G* программного пакета Gaussian 09W на персональном компьютере Pentium IV/4.28 ГГц.

Рассмотрено три положения для взаимодействия SFR с CNT (8,0-10). Значения энергии (E) для трех оптимизированных состояний I, II, III составляют -4023.654, -4023.662, -4023.674 Хартри, соответственно. Вычисленные энергии показывают, что наиболее стабильным является состояние III.

Установлено, что электронное состояние сульфоафана изменяется при адсорбции на нанотрубках CNT (8,0-10). Дипольный момент комплекса CNT (8,0-10)/SFR увеличивается с 0,0004 до 3,6524 Дб.

Установлено, что образованный комплекс сульфоафана с нанотрубками CNT (8,0-10). энергетически более стабилен по сравнению с молекулой сульфоафана.