مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

جذب نیتروتیروسین روی نانولوله‌های کربنی ذاتی و آلاییده با آلومینیوم

رویا مجیدی[۱]، علیرضا کرمی گزافی[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

[۲] گروه شیمی، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

چکیده

جذب مولکول نیتروتیروسین روی نانولوله‌های کربنی (۷،۰) خالص و آلاییده با آلومینیوم با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. نانولوله کربنی (۷،۰) خالص دارای خاصیت نیمرسانایی و نانولوله کربنی (۷،۰) آلاییده با آلومینیوم نیمرسانای نوع p هستند. نتایج حاکی از آن است که این نانولوله‌های کربنی در حضور مولکول نیتروتیروسین نیمرسانای نوع n می‌باشند. حضور آلومینیوم باعث افزایش انرژی جذب شده است. حساسیت خواص الکترونی نانولوله‌های کربنی به حضور نیتروتیروسین حاکی از امکان استفاده از این نانوساختار کربنی به عنوان حسگری برای آشکارسازی نیتروتیروسین است.

نیتروتیروسین یک آمینو اسید تغییر یافته با ویژگی‌های متفاوت از تیروسین یا هر نوع آمینو اسیدی است که به صورت ژنتیکی کدگذاری شده است [۱]. نیتروتیروسین در برخی از بیماری‌ها از قبیل پارکینسون و یا آلزایمر نقش دارد [۲]. تشخیص حضور نیتروتیروسین در فرایندهای زیستی اولین قدم برای درک بهتر نقش این مولکول روی سلامتی یا بیماری است و این یک مرحله مهم برای تشخیص روند بیماری است.

پس از کشف گرافن و نانولوله‌های کربنی، این نانوساختارها به دلیل کاربردهای بالقوه توجه بسیاری را برای تحقیقات بنیادین به سمت خود جلب نموده‌اند. نتایج مطالعات حاکی از آن است که نانولوله قابلیت آشکارسازی مولکول‌های مختلف را دارد [۳ و ٤]. هدف این مقاله بررسی حساسیت خواص الکترونی نانولوله نیمرسانای ذاتی و آلاییده با اتم آلومینیوم به حضور مولکول نیتروتیروسین می‌باشد. در این مقاله اثر نیتروتیروسین روی خواص الکترونی نانولوله با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شده است.

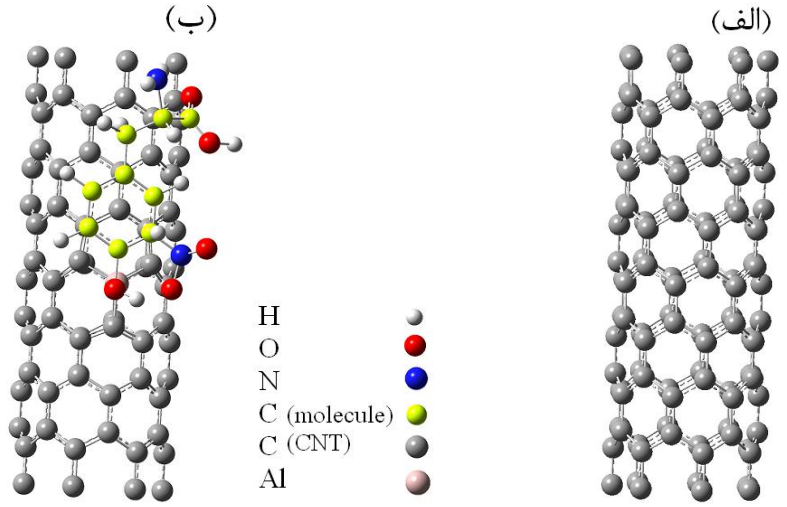
جزئیات محاسبات

ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات الکترونی بر مبنای نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار openMX3.6 تعیین شده‌اند [۵]. در محاسبات از پتانسیل تبادلی همبستگی پردو بورک ارنزرهف (PBE) در تقریب شیب تعمیم یافته استفاده شده است. انرژی قطع ۱۵۰ ریدبرگ فرض شده است. در راستای محور نانولوله در منطقه اول بریلوئن ۵۱ نقطه K درنظر گرفته شده است. همه ساختارهای اتمی از نظر هندسی بهینه‌سازی شده‌اند. در اینجا نانولوله‌های نوع زیگزاگ (۷،۰) ذاتی و آلاییده با ناخالصی آلومینیوم بررسی شده‌اند. ابرسلولی با ٤ سلول واحد در طول محور نانولوله

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

در نظر گرفته شده است (شکل ۱). شرایط مرزی تناوبی در راستای محور نانولوله کربنی اعمال شده است. برای آلاییدن نانولوله کربنی، یک اتم آلومینیوم به عنوان ناخالصی جانشین یک اتم کربن شده است.

برای تعیین پایدارترین مکان جذب،. مولکول نیتروتیروسین در مکان‌های مختلف روی سطح نانولوله قرار داده شده و انرژی جذب محاسبه شده است. بهترین مکان جذب مربوط به ساختاری با انرژی جذب کمینه است. به عنوان مثال، پایدارترین ساختار نیتروتیروسین جذب شده روی نانولوله کربنی (۷،۰) آلاییده با آلومینیوم در شکل ۱ نشان داده شده است. مقادیر انرژی جذب نیتروتیروسن روی نانولوله ذاتی و آلاییده به ترتیب ٤/١٧- و ٥/٣٥- الکترون ولت می‌باشد. این مقادیر بزرگ انرژی جذب، حاکی از جذب شیمیایی نیتروتیروسین روی نانولوله‌های کربنی می‌باشد. همچنین حضور آلومینیوم باعث افزایش انرژی جذب ساختار شده است.



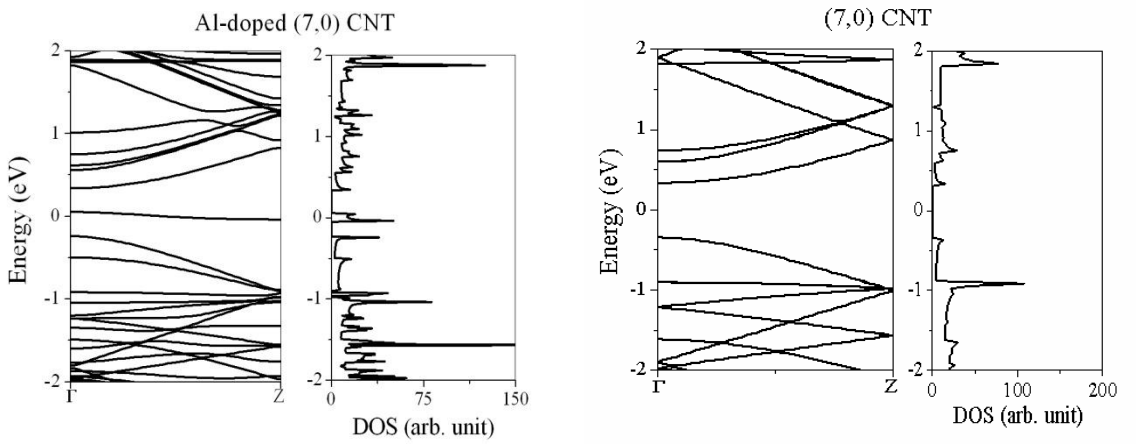
شکل۱ : (الف) ساختار نانولوله کربنی (۷،۰) ذاتی، (ب) ساختار نانولوله کربنی (۷،۰) آلاییده با آلومینیوم در حضور نیتروتیروسین

خواص الکترونی نانولوله‌های کربنی (۷،۰) ذاتی و آلاییده با آلومینیوم

ابتدا خاصیت الکترونی نانولوله‌های کربنی (۷،۰) ذاتی و آلاییده آلومینیوم مطالعه شده‌اند. ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات این نانولوله‌های کربنی در شکل ۲ نشان داده شده است. گاف انرژی بین نوار ظرفیت و رسانش و چگالی حالت صفر در تراز انرژی فرمی (صفر الکترون ولت) حاکی از

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

خاصیت نیمرسانایی نانولوله کربنی (۷،۰) ذاتی است. حضور ناخالصی آلومینیوم باعث اضافه شدن تراز انرژی خالی و پیک تیزی بالای تراز انرژی فرمی شده است. بنابراین نانولوله کربنی (۷،۰) آلاییده با ناخالصی آلومینیوم، نیمرسانای نوع p می‌باشد. علت این تغییر این است که تعداد الکترون‌های تراز آخر اتم آلومینیوم از اتم کربن کمتر است. بنابراین ناخالصی آلومینیوم به عنوان گیرنده الکترون باعث تبدیل نیمرسانای ذاتی به نیمرسانای نوع p شده است.

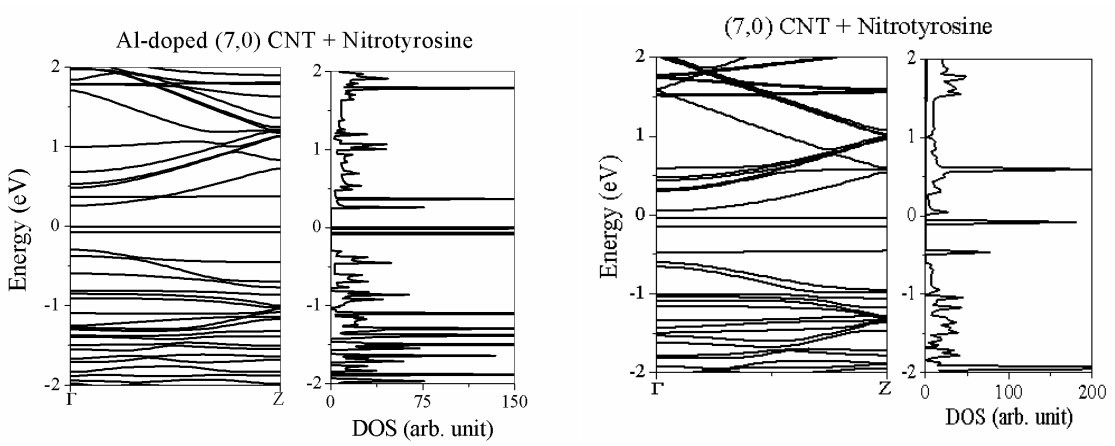


شکل ۲ : (الف) ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات نانولوله‌های کربنی (۷،۰) ذاتی و آلاییده با آلومینیوم

اثر جذب نیتروتیروسین روی خواص الکترونی نانولوله‌های کربنی (۷،۰) ذاتی و آلاییده با آلومینیوم

در شکل ٤ ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات نانولوله (۷،۰) ذاتی و آلاییده با آلومینیوم در حضور مولکول نیتروتیروسین نشان داده شده است. جذب مولکول نیتروتیروسین باعث اضافه شدن ترازهای پر زیر تراز انرژی فرمی در ساختار نوار الکترونی و ایجاد پیک‌های تیزی در چگالی حالات این نانولوله‌های کربنی شده است. بنابراین نانولوله‌های کربنی (۷،۰) ذاتی و آلاییده در حضور نیتروتیروسین تبدیل به نیمرسانای نوع n شده‌اند. با جذب نیتروتیروسین گاف انرژی کاهش یافته است. محاسبه بار انتقالی بین نانولوله‌های کربنی و مولکول نیتروتیروسین حاکی از آن است که بار از مولکول به نانولوله انتقال یافته است. بنابراین با جذب این مولکول دهنده بار نانولوله‌های کربنی تبدیل به نیمرسانای نوع n شده‌اند.

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)



شکل ۳ : (الف) ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات نانولوله‌های کربنی (۷،۰) ذاتی و آلاییده با آلومینیوم در حضور نیتروتیروسین

نتیجه گیری

اثر جذب مولکول نیتروتیروسین روی خواص الکترونی نانولوله‌های کربنی (۷،۰) ذاتی و آلاییده با آلومینیوم با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی مطالعه شده است. محاسبه انرژی جذب حاکی از آن است که جذب مولکول نیتروتیروسین روی نانولوله‌های کربنی از نوع شیمیایی است و حضور ناخالصی آلومینیوم باعث افزایش قدرت جذب شده است. ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات الکترونی نانولوله‌های کربنی در حضور و عدم حضور مولکول نیتروتیروسین مقایسه شده‌اند. نتایج حاکی از آن است که نانولوله کربنی ذاتی نیمرسانای ذاتی و نانولوله کربنی آلاییده با آلومینیوم نیمرسانای نوع p هستند. با جذب مولکول نیتروتیروسین این نانولوله‌های کربنی تبدیل به نیمرسانای نوع n شده‌اند. تغییر در خواص الکترونی نانولوله‌های کربنی در اثر جذب مولکول نیتروتیروسین بیانگر این است که نانولوله‌های کربنی کاندیدهای مناسبی برای استفاده به عنوان حسگر برای آشکارسازی مولکول نیتروتیروسین هستند.

متن سپاسگزاری

این پژوهش با حمایت مالی دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی طبق قرارداد شماره ۱۹۰۰۵ مورخ ۹۳/۷/۲۲ انجام گردیده است.

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

مرجع‌ها

1. F. Dekker, N. Abello, R. Wisastra, R. Bischoff, “Enrichment and Detection of Tyrosine-Nitrated Proteins”; *Curr. Protoc. Protein. Sci.* Aug.: Unit14.13 (2012).

2. N. Abello, H.A. Kerstjens, D.S. Postma, R. Bischoff, “Protein tyrosine nitration: selectivity, physicochemical and biological consequences, denitration, and proteomics methods for the identification of tyrosine-nitrated proteins”; *J. Proteome. Res.* **8** (2009) 3222-3238.

3. S. Li, J. Singh, H. Li, I.A. Banerjee, *“Biosensor Nanomaterials”*; Germany: Wiley-VCH Verlag (2011).

4. B. Leca-Bouvier, L.J. Blum, “Biosensors for Protein Detection: A. Review”; *Analyt. Lett.* **38** (2005) 1491-1517.

5. T. Ozaki, et al. User’s manual of OpenMX version 3.6