



Evaluation of the Theory of Folic Acid Adsorption on Aluminum-Nitride Nanotubes

S. Bandari¹, H. Sakhaeinia^{2*}, F. Pajoum Shariati³

1- M. Sc. Student in Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering, Science and Research Unit, Islamic Azad University, Tehran, Iran

2- Assistant Professor of Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering, Central Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

3- Assistant Professor of Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering, Science and Research Unit, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Email: h.sakhaeinia@iauctb.ac.ir

Abstract

In recent years, structures such as nanotubes, fullerenes, graphenes, etc., have attracted attention due to their electronic properties, which means that they can be used in drug delivery. Folic acid anemia has harmful effects on growth and defects in the fetus. In this research, the optimal absorption of folic acid in the human body has been investigated using the methods of quantum mechanical calculations, density functional theory and the nature of the non-bonded interaction of folic acid with the nitride tube. It is also a study of the theory of the structure of tube-nitride nanotubes using the density subordination method (B3LYP) and the 6-31G basis set. After optimizing the structures, the energy of reacting orbitals, vibrational frequencies, ground state thermodynamic functions, density of electron levels have been investigated and studied. According to the obtained results, the energy level of HOMO and LUMO in the most optimal and stable state with transfer charge (eV) of 2.16 is a suitable choice for folic acid sensor or detector. The energy level gap of aluminum-nitride nanotube structure is 4.32 (eV), after the absorption of folic acid molecule, the energy level gap has decreased, which shows that the structure is chemically active. Finally, according to the obtained results, the aluminum-nitride nanotube structure is a suitable carrier for the folic acid molecule.*

Received: 14 October 2023

Accepted: 30 January 2024

Page Number: 62-74

Keywords:

Molecular Simulation,
Adsorption,
Nanotubes,
Aluminum- Nitride,
Folic Acid

Please Cite this Article Using:

Bandari, S., Sakhaeinia, H., & Pajoum Shariati, F. (2025). Evaluation of the Theory of Folic Acid Adsorption on Aluminum-Nitride Nanotubes. *Iranian Chemical Engineering Journal*, 23(137), 62-74, [In Persian].



ارزیابی تئوری جذب فولیک اسید بر روی نانولوله آلومینیوم - نیتريد

سحر بندری^۱، حسین سخائی نیا^{۲*}، فرشید پژوم شریعتی^۳

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، گروه مهندسی شیمی، واحد علوم و تحقیقات،

دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

۲- استادیار مهندسی شیمی، گروه مهندسی شیمی، واحد تهران مرکزی، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

۳- استادیار مهندسی شیمی، گروه مهندسی شیمی، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

پیام نگار: h.sakhaeinia@iauctb.ac.ir

چکیده

طی سالیان اخیر ساختارهایی هم چون نانولوله ها، فولرن ها، گرافن ها و غیره به دلیل ویژگی های الکترونی به منظور کاربرد در انتقال دارو توجه بسیاری را به خود جلب کرده است. کمبود اسید کم خونی، تأثیرات مخربی در رشد و کاستی هایی در جنین برجای می گذارد. در این تحقیق، جذب بهینه اسید فولیک در بدن انسان با استفاده از روش های محاسبات مکانیک کوانتومی تئوری تابعی چگالی و ماهیت برهم کنش غیر پیوندی اسید فولیک با آلومینیوم نیتريد بررسی شده است. هم چنین مطالعه نظری ساختار نانولوله آلومینیوم - نیتريد به روش تابعیت چگالی (B3LYP) و مجموعه پایه *6-31G است. پس از بهینه سازی ساختارها، انرژی اوربیتال های واکنش دهنده، فرکانس های ارتعاشی، توابع نرمودینامیکی حالت پایه، چگالی سطوح الکترونی بررسی و مطالعه شده است، که باتوجه به نتایج به دست آمده، سطح انرژی HOMO و LUMO در بهینه ترین و پایدارترین حالت با بار انتقالی (eV) ۲/۱۶ انتخابی مناسب برای سنسور یا تشخیص دهنده اسید فولیک است. شکاف سطوح انرژی ساختار نانولوله آلومینیوم - نیتريد (eV) ۴/۳۲ است، بعد از جذب مولکول فولیک اسید شکاف سطوح انرژی کاهش یافته است که فعال بودن ساختار را از لحاظ شیمیایی نشان می دهد. در نهایت، باتوجه به نتایج به دست آمده، ساختار نانولوله آلومینیوم - نیتريد حامل مناسبی برای مولکول فولیک اسید است.

کلیدواژه ها:

شبیه سازی مولکولی،
جذب،
نانولوله،
آلومینیوم - نیتريد،
اسید فولیک

* تهران، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تهران مرکزی، گروه مهندسی شیمی
استناد به مقاله:

بندری، سحر، سخائی نیا، حسین، و پژوم شریعتی، فرشید. (۱۴۰۳). ارزیابی تئوری جذب فولیک اسید بر روی نانولوله آلومینیوم - نیتريد، نشریه مهندسی شیمی ایران، ۲۳ (۱۳۷)، ۶۲-۷۴.

۱. مقدمه

اسید فولیک در بدن انسان تولید نمی‌شود، اما وجود فولات برای بدن اهمیت بسیار دارد. دی‌هیدروفولات و تتراهیدروفولات از مشتقات ویتامین فولات است و ترکیباتی است که برای بدن به خصوص در همانندسازی (تکثیرسازی) و DNA ضروری است [۱]. اسید فولیک در کشاورزی کاربرد دارد و در کودهای مختلف مثل اسید هومیسول وجود دارد [۲].

نانولوله‌ها همراه با گرافن و فولرن‌ها، سه‌گانه شگفت‌انگیزترین آلوتروپ‌های کربن را تشکیل می‌دهند که خواص ویژه آن‌ها گرایش بسیاری به منظور ایجاد ویژگی‌های باب طبع در مواد و کاربردهای متعدد آن‌ها به وجود آورده است. محققان پس از مطالعات انبوه دریافتند که با جای‌گزینی و آرایش عناصر دیگر می‌توانند در این ساختارها ویژگی‌های مورد نظر را به وجود آورند؛ این ساختارها در مواردی هم چون رسانایی الکتریکی، استحکام و انعطاف، خواص قابل توجهی دارند که از این نظر در مصارف دارویی کاربردی هستند. پس از کشف ترکیبات کربنی در مقیاس نانو، علاقه به یافتن مواد و ترکیبات نانومقیاس دیگر نیز رو به افزایش گذاشت [۳]. نانولوله کربن یکی از مناسب‌ترین نانوساختارهایی است که با توجه به مشخصات شیمیایی و فیزیکی شناخته شده، می‌تواند به خوبی در ساخت نانوزیست‌حسگرها به کار گرفته شود. نانولوله‌های کربنی برای این‌که بتوانند به عنوان پایه حسگر قرار گیرد و بهتر عمل کند، باید بر روی سطحی تثبیت شود [۴]. بور-نیتريد ترکیبی است که شباهت ساختاری بسیار نزدیکی با ترکیبات کربنی دارد و در سال‌های اخیر توجه بسیاری گرفته است. نانولوله ترکیب (آلومینیوم-نیتريد) ترکیب نیمه‌رسانا است که خواص الکترونی آن برخلاف نانولوله‌های کربنی به کایرالیتیه (یک خاصیت ناشی از عدم تقارن است که در شاخه‌های مختلفی از علوم کاربرد دارد) بستگی ندارد. محققان پس از مشاهده عملکردهای متفاوت نانولوله‌های کربنی از جمله تغییر شکل آن‌ها، توانستند انواع دیگری از نانولوله‌ها را پیشنهاد کنند. از این‌رو، نانولوله آلومینیوم-نیتريد محبوب دانشمندان شد؛ زیرا نوسانات عملکردی مناسب‌تری دارد [۵]. نانولوله‌های آلومینیوم-نیتريد از جمله نانولوله‌های جای‌گزین نانولوله‌های کربنی است. در این کار تحقیقاتی، ساختاری از نانولوله آلومینیوم-نیتريد (۸-۰) در دو مدل نانولوله آلومینیوم-نیتريد خالص و نانولوله

آلومینیوم-نیتريد با ناخالصی کربنی انتخاب شد. ابتدا هریک از ساختارها به میزان حداقل سطح انرژی بهینه شدند. در این راستا، مطالعاتی به شکل تجربی و نظری انجام شده است که هم‌چنان برای شناسایی خواص و ویژگی‌های آن‌ها ادامه دارد. پژوهش‌های نظری و تجربی اخیر نشان می‌دهد که نانولوله‌های غیرکربنی می‌توانند پایدار باشند [۶].

این پژوهش بر آن است تا نانولوله آلومینیوم-نیتريد را برای جذب ساختار فولیک اسید شناسایی و خواص ساختار الکترونی را-مانند انرژی شکاف، توابع ترمودینامیکی حالت پایه، فرکانس‌های ارتعاشی، تئوری تابع چگالی الکترون^۱، تحلیل اوربیتال پیوندی طبیعی^۲، انرژی اوربیتال‌های واکنش‌دهنده^۳، نمودار چگالی حالت‌های انرژی، خواص ترمودینامیکی آن‌ها، چگالی سطوح الکترونی-به‌دست آورد و سپس بستر مناسب را در جهت حامل (اسید فولیک) که جنبه دارویی، درمانی و مکمل غذایی بسیار حائز اهمیتی در صنعت دارویی و کشاورزی دارد، معرفی کند. شناخت ترکیبات نو و مواد درمقیاس نانو در سال‌های اخیر، تمایل گسترده‌ای را به وجود آورده است. نانولوله‌ها به دلیل خواص ویژه و مطلوب، توجه خاصی گرفته و پژوهش‌های وسیعی پیرامون آن انجام شده است [۷]. اما ارتباط شدید خواص این مواد نوین به کایرالیتیه یکی از چالش‌های مهم است. در فرایندهای تجربی، تاکنون روشی به منظور تفکیک کایرالیتیه‌های متفاوت برای بهره‌برداری در کاربردهای ویژه عرضه نشده است. بر این اساس، به منظور جست‌وجوی ترکیبات نانو با مقیاس جدید- که خواص آن‌ها به کایرالیتیه وابسته نباشد- تلاش گسترده‌ای آغاز شد. یکی از مهم‌ترین موادی که در حوزه‌های متعدد نانو الکترونیک و جز آن کاربرد دارد، ترکیب آلومینیوم-نیتريد (AlN) است. اثبات پایداری نانولوله‌های آلومینیوم-نیتريد به صورت نظری و تجربی و بعضی از فولرن-گونه‌های آن به شکل تئوری نیز انجام شده است [۸].

از آنجایی که رسانش دارو روشی نوین و کارآمد در زمینه زیست‌فناوری است، کارهای پژوهشی متعددی بر روی انواع مختلفی از دارو انجام و منتشر شده است؛ لی و همکاران در سال ۱۹۹۸ مولکول سیس‌پلاتین را بر روی فولرن بور-نیتريد ۳۲ اتمی باروش DFT - که ساختار فولرن بور-نیتريد به‌عنوان تشخیص‌دهنده مولکول سیس‌پلاتین

1. Hybrid DFT
2. NBO
3. HOMO-LUMO Energy bond gaps

با استفاده از نظریه DFT بهره گرفتند [۱۶]. در سال ۲۰۲۲ شادی^۵ و همکاران به کمک نظریه DFT از نانولوله آلومینیوم- نیتريد به عنوان حامل داروی ضد تشنج لوودوپا استفاده کردند که انرژی برهم کنش اسید فولیک با نانولوله آلومینیوم- نیتريد برای رهائش دارو از نانولوله و رسیدن به سلول هدف با روش مطالعه ای DFT بررسی شد [۱۷]. در این کار، برای تجزیه و تحلیل اوربیتال های مولکولی ترکیب های مبتنی بر شبیه سازی فولیک اسید و چگونگی واکنش آن با نانولوله AIN، از نظر انرژی برهم کنش اسید فولیک و نانولوله آلومینیوم- نیتريد و ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد به عنوان حامل و به عنوان تشخیص دهنده مناسب مولکول اسید فولیک مطالعه و نتایج آن بررسی شده است. هم چنین، ساختار آلومینیوم نیتريد در این پژوهش ساختار همگن و یکنواخت است، اتم های نیتروژن و آلومینیوم به صورت زیگزاگی جای گذاری شده و ظرفیت اتم ها اشباع است. در سال ۲۰۱۴ رونقی^۶ و همکاران در پژوهشی تجربی پس از بررسی بر اساس نتایج شبیه سازی، مشخص کردند که ملامین از راه گروه های آمین متصل به حلقه تری آزین، تمایل شدیدی برای جذب بر روی سطح آلومینیوم دارد. اتم های نیتروژن جدا شده از مولکول ملامین به درون شبکه آلومینیوم، نفوذ و مکان های اکتاهدرال شبکه را اشغال می کنند. با ادامه نفوذ نیتروژن به درون شبکه آلومینیوم، ساختار به حالت فوق اشباع رسید، در نتیجه این مطالعات، حضور شبکه های کربنی با اندازه بلورهای حدود ۲ nm در کنار ذرات ALN شناسایی شد. در مرحله بعد، با حرارت دادن محصولات آسیاکاری تحت اتمسفر آرگون، نانوکامپوزیت جدیدی از ذرات آلومینیوم- نیتريد و نانولوله های کربنی چند جداره سنتز شد [۱۸].

۲. تئوری و روش اجرای محاسبات

با توسعه دانش رایانه و ساخته شدن رایانه های توسعه یافته، بهره برداری از این وسیله در علوم متعدد از جمله فیزیک، شیمی و غیره برای حل بسیاری از مسائل رو به فزونی است. شیمی محاسباتی شاخه ای از علم شیمی است که برای به دست آوردن اطلاعات متعدد اتم ها، مولکول های کوچک و بزرگ مرتبط به ساختار، واکنش پذیری، ویژگی های بنیادی، داده های ترمودینامیکی و غیره از ابزارهای

است- بررسی کرده اند [۹]. کوروت سنه او و همکاران در سال ۲۰۰۶ فولرن را (بور- سیلیکون- آلومینیوم) به عنوان حامل داروی فلوروراسیل-۵، به روش DFT مطالعه کردند [۱۰]. یکی دیگر از پژوهش هایی که در این زمینه انجام شده است، انتخاب نانوذرات SiO₂ به عنوان حامل دارو است. در سال ۲۰۱۱ کومینی و همکاران، با تئوری برهم کنش الکترونی، نانوحامل های سلولزی را با ویتامین B6 مطالعه کردند و میزان انرژی جذب ناشی از برهم کنش را بر روی خواص ساختاری و الکترونی و نیز میزان واکنش پذیری ویتامین B6 را در حضور نانوحامل های سلولزی بحث و بررسی کردند [۱۱]. در سال ۲۰۱۱ کیم و همکاران، کپسوله کردن فلورواتانول ها را در نانوحامل های سلولزی دارای نقص ساختار به روش محاسبات مکانیک کوانتومی DFT مطالعه کردند. نانوحامل های سلولزی می تواند یک حامل مفید برای این دارو باشد و این بسترها موادی کارآمد برای ذخیره سازی اتانول و فلوئور اتانول است [۱۲]. به تازگی، مطالعات متعددی به صورت تجربی برای ساخت حامل های دارویی نانو انجام گرفته است. در سال ۲۰۱۸ دوست محمد^۱ و همکاران، از نانولوله های آلومینیوم- نیتريد، برم- نیتريد، کربن و سیلیکون- کاربرد برای کنترل جذب برم- متان با استفاده از مطالعات DFT, QAIM استفاده کردند که نانولوله آلومینیوم- نیتريد بهترین بازدهی برای کنترل جذب برم- متان داشت و در این پروژه نانولوله آلومینیوم- نیتريد به عنوان جاذب اسید فولیک مطالعه و بررسی شد [۱۳]. در سال ۲۰۲۰ عیوبی^۲ و همکاران نانولوله های آلومینیوم- نیتريد کوپل شده با ورقه های کربن و سیلیسیوم را برای رهائش داروی ضد سرطان بنداموستین با روش مطالعه ای DFT بررسی کردند [۱۴]. در سال ۲۰۲۱ گان^۳ و همکاران با نظریه DFT بر روی رهائش کنترل شده داروهای ضد سرطان کار کردند که در این پروژه رهائش داروی اسید فولیک از نانولوله آلومینیوم- نیتريد با روش مطالعه DFT بررسی شد [۱۵]. در سال ۲۰۲۲ صالح^۴ و همکاران از نانولوله های آلومینیوم- نیتريد به عنوان یک حامل برای داروی ضد سرطان 5-aminosalicylic acid با استفاده از نظریه DFT مطالعه و بررسی کردند؛ در این پروژه نیز از نانولوله های آلومینیوم- نیتريد به عنوان حامل و سنسور برای اسید فولیک

1. Doust Mohammad
 2. Ayobi
 3. Gun
 4. Saleh

5. Shadi
 6. Ronaghi

محاسباتی و تئوری ریاضی استفاده می‌کند [۱۹]. والترهایتلر^۱ و فریتز^۲ نخستین محاسبات را در این مورد در سال ۱۹۲۷ در لندن پیشنهاد دادند. بسیاری از مقالات منتشرشده، مرتباً به این شاخه از علم شیمی است. براساس اصول مکانیک کوانتوم و مکانیک کلاسیک، نرم افزارهایی طراحی شده است که با استفاده از آن‌ها، بدون نیاز به اعمال آزمون می‌توان با تشخیص و درک نیروهای حاکم در میان اتم‌ها، واکنش‌پذیری آن‌ها، انرژی‌های پیوندی و انرژی‌های واکنش، مسیر و سازوکار واکنش‌ها، قطبش‌پذیری، فرکانس‌های ارتعاشی، انرژی و ساختارهای حالت‌گذار، نحوه انجام واکنش‌ها، نحوه آرایش اتم‌ها و مولکول‌ها در محیط‌های گوناگون، منحنی‌های انرژی پتانسیل و داده‌های ترمودینامیکی و طیف‌های IR، NMR و غیره اطلاعات مفیدی را به دست آورد. در این پژوهش برای فولیک اسید و نانوالومینیوم نیتريد، با استفاده از آنالیز NBO ابتدا انرژی‌های بالاترین تراز اشغال شده HOMO و پایین‌ترین تراز اشغال نشده LUMO، در نرم‌افزار گوسین به دست آمد. سپس، با کمک این انرژی‌ها، سختی شیمیایی (η)، بیشینه مقدار بار الکترونی Δn_{max} و بار انتقالی یا انرژی فرمی^۳ (مفهومی در فیزیک کوانتوم است که به اختلاف انرژی میان بالاترین و پایین‌ترین حالت اشغال شده فرمیون‌های بی‌نیاز از برهم‌کنش در دمای صفر مطلق اشاره دارد) که یک فرمیون ممکن است یک ذره بنیادی باشد (الکترون) یا ذره مرکب باشد از قبیل (پروتون)) - محاسبه شد [۲۰].

۲-۱ روش‌های محاسباتی گوسین

برنامه گوسین دارای سلسله‌مراتبی از روش‌های مرتبط به شیوه‌های تقریبی گوناگون است. روش‌هایی که اغلب در این برنامه پرداخته می‌شوند بدین صورت است که در آن تابع موج یک سامانه چندالکترونی به صورت حاصل ضرب چندتابع موج تک‌الکترونی است، که میدان خودسازگار هارتري تابع آن است و دلیل وجود این توابع موج، اوربیتال‌های فضایی است. الکترون به وسیله اوربیتال‌های فضایی با توصیف ناقصی ارائه می‌شود، لذا تابع موج وضعیت حقیقی الکترون را نشان می‌دهد، هم‌چنین تابع موج احتمال یافتن الکترون را در هر لحظه در نقطه معینی از فضا مشخص می‌کند و احتمال حضور همان الکترون را در یک حالت اسپین آلفا یا بتا نیز تعیین

1. Walter Heitler
2. Fritz
3. Fermi Energy

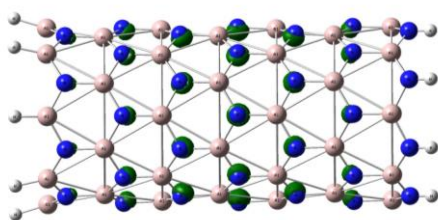
می‌کند [۲۱]. از این‌رو، به منظور آشکار ساختن توابع موج مربوط به یک سامانه چندالکترونی، باید از اسپین اوربیتال به جای اوربیتال‌های فضایی استفاده کرد. عملگر جدیدی موسوم به فاک یکی از روش‌های هارتري فاک^۴ است که تبادل الکترونی را لحاظ می‌کند. پیشنهاد روتان در سال ۱۹۵۱ در خصوص اجرای محاسبات دقیق توابع موج scf (هر الکترون به یک اسپین- اوربیتال اختصاص داده می‌شود) در کمک به مولکول‌ها، یک پیشرفت کلیدی است. هر یک از فاک در واقع به اوربیتال‌های هارتري فاک به صورت ترکیب خطی از یک سری توابع آشکار تحت عنوان توابع پایه، نمایش داده می‌شوند. هر یک از اوربیتال‌های هارتري در واقع یک اسپین اوربیتال هستند [۲۲]. انواع روش‌ها در مبحث DFT پیچیده و گوناگون است که به سه دسته تقسیم می‌شود: الف) روش‌هایی که تابع تقریب چگالی موضعی است. این روش فقط بر محور خواص چگالی الکترون تخمین زده می‌شود. فرض قابل درنگ این تقریب آن است که در حالت گازی برای یک مولکول با الکترون‌های انبوه، در سراسر مولکول چگالی یک‌نواخت در نظر گرفته شده است. در حالی که چگالی الکترون برای مولکول‌ها این‌گونه نیست؛ چراکه قطعاً یک‌نواخت نیست. ب) روش‌هایی که چگالی الکترون ارزیابی شده را با یک ضریب تصحیح گرادیان ترکیب می‌کند. در ریاضیات یک گرادیان تابعی است که سرعت تغییر شماری از مشخصه‌ها را اندازه می‌گیرد. ج) روش‌هایی که همه آن‌ها با یک تابعیت که شامل همبستگی الکترونی است ترکیب می‌شوند که شامل ترکیبی از تقریب هارتري- فاک یا انرژی تبدالی و یک تقریب DFT با انرژی تبدالی هستند. این روش‌ها را روش‌های هیبریدی می‌نامند و از سال ۲۰۰۶ کاربرد این روش‌ها رایج شد. در حال حاضر، تابعیت هیبرید B3LYP محبوب‌ترین روش است که به دست استفان طراحی شده است [۲۳].

۳. ساختارها و روش انجام کار

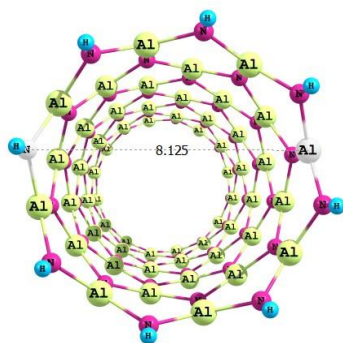
در این پژوهش از روش تابعیت چگالی برای انجام محاسبات استفاده شده است. نانولوله آلومینیوم- نیتريد از بین نانوساختارهای گوناگون در نظر گرفته شد و در طول این تحقیق، تمام محاسبات بر روی این ساختار انجام شد. در این پژوهش ساختار الکترونی و خواص فیزیکی و شیمیایی ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد و این‌که چه تأثیراتی بر روی ساختار الکترونی و خواص شیمیایی آن‌ها در حضور اسید

4. HartreeFock

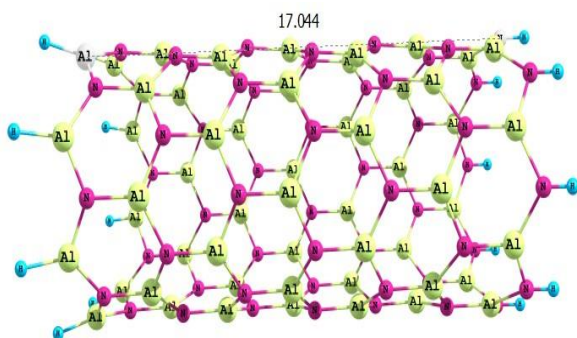
سپس، در ساختارهای بهینه شده، مشخصه های طیف سنجی تشدید مغناطیس هسته حساب شد. نتایج حاکی از آن است که اتم های آلومینیوم و نیتروژنی که در دهانه نانولوله قرار دارد به ترتیب کمترین و بیشترین مقادیر مشخصه پوشش شیمیایی هسته را در بین اتم های دیگر دارا است. در مدلی که کربن جای گزین شده، مشخصه های طیف سنجی تشدید مغناطیس هسته های آلومینیوم و نیتروژنی که مستقیم به کربن متصل هستند، دچار تغییرات زیادی می شود؛ در حالی که در مورد سایر اتم ها تغییرات ناچیز است [۲۶-۲۷].



شکل ۲. ساختار نانولوله آلومینیوم-نیتريد.
 Figure 2. Aluminum-nitride nanotube structure.



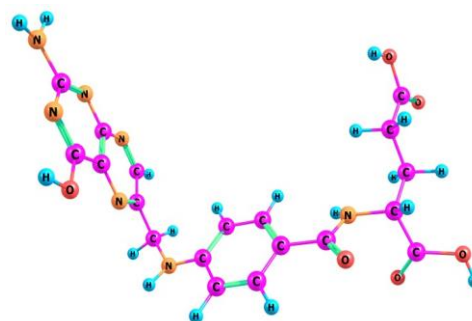
شکل ۳. ساختار بهینه نانولوله آلومینیوم-نیتريد.
 Figure 3. Optimal structure of aluminum nitride nanotubes.



شکل ۴. قطر و طول نانولوله آلومینیوم-نیتريد.
 Figure 4. Diameter and length of aluminum nitride nanotube.

فولیک به عنوان حامل در ساختار نانولوله آلومینیوم-نیتريد دارد، بررسی شد [۲۴].

ابتدا، ساختار فولیک اسید از پایگاه اطلاعاتی پاب کم با فرمول شیمیایی $C_{19}H_{19}N_7O_6$ که یک ترکیب شیمیایی با کد شناسه پاب کم ۴۰۳۷ است، انتخاب شد. سپس باروش های استاندارد در زمینه مکانیک کوانتوم به وسیله نرم افزار محاسباتی Gaussian09 بهینه سازی اولیه شد و در مرحله بعد، ساختار نانولوله AlN با نرم افزار Gaussian09 رسم و همانند فولیک اسید، بهینه سازی اولیه (انرژی مولکول با تغییر طول و زوایا حداقل شد) انجام شد؛ شکل های (۲)، (۳) و (۴) که بعد از این مراحل ساختار نانو به عنوان بستر ثابت، مولکول فولیک اسید بر روی آن قرار داده شد، با همان روش قبلی این مرحله نیز انجام شد و در پایان به کمک مشخصه های خروجی از ساختارها که عبارت است از انرژی جذب، شکاف انرژی، تغییرات شکاف انرژی، بار انتقالی، درصد حساسیت و نتیجه ای که حاصل شد، سطح نانولوله آلومینیوم-نیتريد به عنوان حامل، سنسور یا جاذب برای فولیک اسید معرفی شد.



شکل ۱. ساختار مولکولی فولیک اسید.
 Figure 1. Molecular structure of folic acid.

آلومینیوم-نیتريد ترکیبی شیمیایی با فرمول Al-N است که تعداد اتم های نیتروژن و آلومینیوم در آن مساوی است و از نظر شیمیایی و گرمایی پایداری بسیار بالایی دارد، در مقابل هوا و بعضی مایعات مقاوم است، در خلأ تجزیه نمی شود و تا دماهای بالای ۸۰۰ درجه سانتیگراد هم تجزیه نمی شود. شبکه آلومینیوم-نیتريد بدون تأثیر از زاویه آن، همواره نیمه رسانا است. با روش نظریه تابعی چگالی اثر ناخالصی کربن بر خواص الکترواستاتیکی ساختار نانولوله آلومینیوم-نیتريد زیگزاگ (۸-۰) به دست محققان گروه شیمی فیزیک دانشگاه تربیت مدرس طی پژوهشی بررسی شد [۲۵].

جدول ۱. خواص فیزیکی نانولوله Al-N

Table 1. Physical properties of Al-N nanotubes.

Properties	Amounts	Ref	
Network constants (T=300K)	a _o	0.32496 nm	12
	b _o	0.52069 nm	12
Density	5.606 cm ³	13	
Melting point	2248 K	13	
Dielectric constant	8.66	12	
Energy gap	4.32 ev	13	
Concentration of intrinsic carriers	106 cm ³	12	
Energy depends	60 mev	13	
The effective mass of the electron	0.24	12	
Electron mobility (T=300K)	200 cm ²	12	
Effective cavity mass	0.59	12	
Hole mobility (T=300K)	5-50 cm ²	12	

همان‌طور که در محاسبات اوسانیکاوا^۱ و همکاران و سانگ^۲ و همکاران مطرح شد، بار اتم آلومینیوم مثبت و بار اتم نیتروژن منفی بوده است و به دلیل الکترونگاتیوی تر بودن اتم نیتروژن نسبت به اتم آلومینیوم، مقدار بار هر دو کمتر از یک است [۲۷-۲۸]. برای جذب مولکول فولیک اسید بر روی ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد، ابتدا مولکول فولیک اسید در نزدیک سطح ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد که قبلاً به روش B3LYP و مجموعه پایه 6-31G* انرژی بهینه‌سازی شده‌اند، قرار گرفت و با روش فوق، بهینه‌سازی در دو فاز گاز (جداسازی اسید فولیک در حضور نانولوله) و آب (چون ۷۰ درصد بدن را آب تشکیل می‌دهد) انجام شد [۲۹]. برای جذب فولیک اسید بر روی ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد پس از محاسبات دو حالت در نظر گرفته شد. در حالت‌های دیگر با دور شدن مولکول اسید فولیک از سطح ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد هیچ برهم‌کنشی رخ نداد.

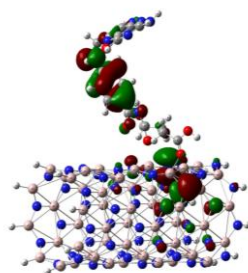
باتوجه به محاسبات گوسین برای بهینه‌سازی از روش B3LYP و مجموعه پایه 6-31G* استفاده شده است.

انتخاب مجموعه پایه با عنصری که در ساختارها قرار دارد، شکل گرفت. برای به دست آمدن انرژی برهم‌کنش از رابطه زیر استفاده شده است:

$$E_{ads} = E_{(Nanotube\ Al-N + Molecule)} - E_{(Nanotube\ Al-N)} - E_{(Molecule)} \quad (1)$$

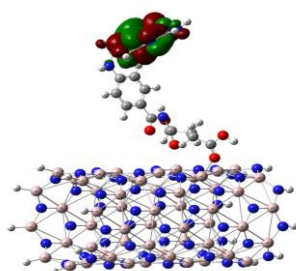
که در آن E_{ads} انرژی برهم‌کنش، $E_{(Nanotube\ Al-N + Molecule)}$ انرژی ساختارهای نانولوله آلومینیوم- نیتريد همراه با مولکول برهم‌کنش داده، $E_{(Nanotube\ Al-N)}$ انرژی ساختار نانولوله مانند قبل از برهم‌کنش و $E_{(Molecule)}$ انرژی مولکول پیش از برهم‌کنش است. برای به دست آمدن مقدار انرژی بر حسب الکترون ولت، باید مقدار انرژی برهم‌کنش را در عدد ۲۷/۲۱۲ ضرب کرد. تمامی واحدها در این پژوهش بر حسب الکترون ولت است. در همه محاسبات انجام شده،

1. Ovsyannikova
2. Song



شکل ۷. جذب مولکول فولیک اسید از سمت کربونیل بر روی ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد حالت HOMO.

Figure 7. Adsorption of folic acid molecule from the carbonyl side on zinc Structure of nanotube aluminum-nitride HOMO state.



شکل ۸. جذب مولکول فولیک اسید از سمت کربونیل بر روی ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد حالت LUMO.

Figure 8. Adsorption of folic acid molecule from the carbonyl side on zinc Structure of nanotube aluminum-nitride LUMO state.

۴. نتایج

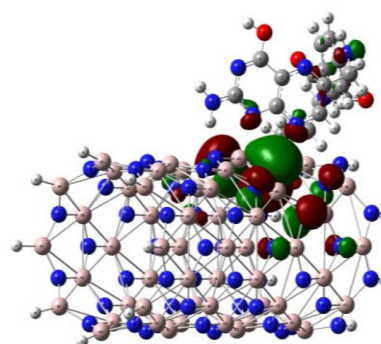
برای تعیین پایداری ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد، ابتدا ساختار بهینه سازی شد؛ به همین منظور، فایل ورودی مورد نظر در نانولوله مدلر^۱ رسم شد: یک نانولوله زیگزاگ با اندازه آنگسترون (۸-۱۰) که این اندازه براساس یک قاعده در این نرم افزار تعریف شده که طول و قطر نانولوله را نشان می دهد. این مختصات به دست آمده با استفاده از روش تابعیت چگالی (B3LYP) و مجموعه پایه *6-31G برای محاسبه به نرم افزار Gaussian 09 فرستاده و نتایج بررسی شد. شکل های (۸) و (۹) [۳۰].

برای رسیدن به کمینه ترین انرژی ساختار بهینه سازی شد تا اجزای آن سامانه به پایدارترین وضعیت ممکن برسند. پیکربندی جدیدی پس از انجام بهینه سازی به یک ساختار فرضی و تغییر ساختار اولیه شکل گرفت. شکل (۲) ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد را پس از

برهم کنش در جایی رخ می دهد که تبادل الکترون در بستر انجام پذیر باشد، اوربیتال خالی و الکترون آزاد وجود داشته باشد و دهنده گی و گیرندگی الکترون شکل گیرد و نیز برهم کنش شیمیایی انجام شود؛ بنابراین حالت های (الف) و (ب) هم چنین در حین محاسبات کمپلکس به پایدارترین حالت رسید (الف) و (ب).

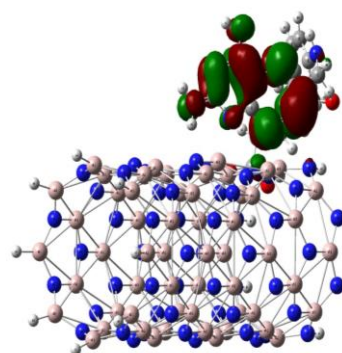
الف) جذب فولیک اسید از سر اتم نیتروژن مولکول بر روی اتم آلومینیوم سطح شکل های (۵) و (۶).

ب) جذب فولیک اسید از سر اتم اکسیژن گروه کربونیل مولکول بر روی اتم آلومینیوم سطح شکل های (۷) و (۸). در این پژوهش ضمن بهینه سازی انرژی، محاسبات همه مشخصه های هندسی ساختارها قابل تغییر بوده و هیچ نوع محدودیتی گذاشته نشده است.



شکل ۵. جذب مولکول فولیک اسید از سمت N بر روی ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد حالت HOMO.

Figure 5. Adsorption of folic acid molecule from the N side on zinc Structure of nanotube aluminum-nitride HOMO state.



شکل ۶. جذب مولکول فولیک اسید از سمت N بر روی ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد حالت LUMO.

Figure 6. Adsorption of folic acid molecule from the N side on zinc Structure of nanotube aluminum-nitride LUMO state.

1. Nanotube Modeller

ترکیب به گونه‌ای است که در آن یک اتم به آنیون و اتم دیگر به کاتیون تبدیل می‌شود، اگر یک اتم دارای انرژی یونیزاسیون بالا و الکترون‌خواهی بالا باشد، چون هنگام شکل‌گیری پیوند، الکترون‌ها را به سمت خود می‌کشد، بنابراین، به‌عنوان الکتروپوزیتیو طبقه‌بندی می‌شود. این مشاهدات، توصیف مولیکن را به‌عنوان مقدار میانگین انرژی یونش و الکترون‌خواهی عنصر معرفی می‌کند. در اتم‌های ساختار برای اتم نیتروژن برابر با 0.798^- و برای اتم آلومینیوم برابر با 0.82^+ است [۳۱].

عمل بهینه‌سازی، نشان می‌دهد. در شکل (۳) اندازه‌گیری قطر حلقه، مسافت دو اتم نشان داده و طول پیوندهای تمام اتم‌های ساختار اندازه‌گیری شده‌است. جدول (۲) هم‌چنین، اوربیتال‌های مولکولی HOMO^۱ (بالا‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال‌شده) و LUMO^۲ (پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال‌نشده) شکل‌های (۸) و (۹). با استفاده از برنامه Gaussian09 نمودار DOS^۳ رسم شد. شکل (۱۲). هم‌چنین، ساختار سطوح پتانسیل الکترواستاتیک^۴ (ESP) نیز رسم شد. شکل (۱۱). مقدار بار مولیکن^۵ (اولین توصیف نظری الکترونگاتیوی عناصر که توزیع مجدد الکترون در طی تشکیل

جدول ۲. داده‌های هندسی ساختار، طول پیوندها برحسب آنگسترم.

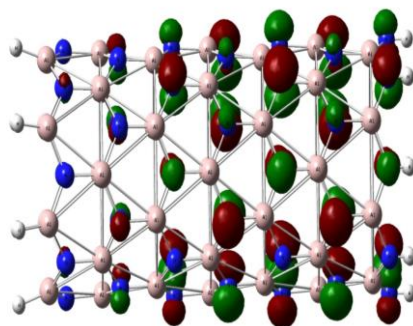
Table 2. Geometrical data of the structure, bond lengths in Angstroms- Nanotube modeler.

Structure	Ring diameter	Al-H	Al-N	N-H	Ref.
Aluminum nitridenano tube	8.2	1.58	1.81	1.01	Current STUDY

جدول ۳. سطوح انرژی HOMO و LUMO و شکاف انرژی بین آن‌ها (eV) و ممان دوقطبی (Debye).

Table 3. HOMO and LUMO energy levels and energy gap between them (eV) and dipole moment (Debye)-B3LYP/6-31g*

Structure	HOMO	LUMO	Gap	Dipole moment (Debye)	Ref.
Aluminum nitride nanotube	-0.21538	-0.12565	4.32	-	Current STUDY
Aluminum nitride nanotube + Folic acid b	-0.23329	-0.07439	2.44	1.88	Current STUDY
Aluminum nitride nanotube + Folic acid b	-0.21674	-0.08829	3.50	0.82	Current STUDY



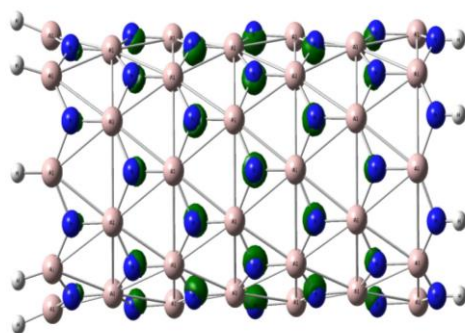
شکل ۹. اوربیتال‌های مولکولی HOMO نانولوله آلومینیوم- نیتريد.

Figure 9. HOMO molecular orbitals of aluminum nitride nanotube.

1. Highest Occupied Molecular Orbital
4. Electron Estatic Surface Potential

2. Lowest Unoccupied Molecular Orbital
5. Mulliken Electronegativity

3. Density of state



شکل ۱۰. اوربیتال‌های مولکولی LUMO نانولوله آلومینیوم- نیتريد.
 Figure 10. LUMO molecular orbitals of aluminum nitride nanotube.

جدول ۴. داده‌های انرژی جذب (eV) در دو فاز آب و گاز، سطوح انرژی (eV) و مقدار تغییرات شکاف انرژی (eV).

Table 4. The data of absorption energy (eV) in two phases of water and gas, energy levels (eV) and the amount of changes in the energy gap (eV).

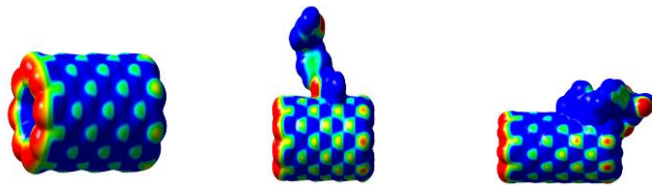
Structure	Eads (GC) (eV)	Eads (water) (eV)	HOMO	LUMO	Gap	Agap	%sensitive	Efermi (eV)	Ref.
nanotube8-0AlN	-	-	-0.21538	-0.12565	4.32	-	-	2.16	Current STUDY
nanotube8-0 AlN+fulvicacide-a	-1.91	-1.69	-0.23329	-0.07439	2.44	1.88	43.5	1.22	Current STUDY
nanotube8-0 AlN+fulvicacide-b	-1.23	-1.82	-0.21674	-0.08829	3.50	0.76	19.0	1.75	Current STUDY

۵. نتایج و بحث

در ساختار بهینه‌شده نشان داده شده است که جذب مولکول فولیک اسید از سمت N بر روی ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد حالت HOMO که فاصله بین مولکول فولیک اسید و ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد در شکل (۵) مشخص است که نشان می‌دهد در آن مولکول اسید فولیک به نانولوله آلومینیوم- نیتريد کاملاً نزدیک شده و برهم کنش شیمیایی رخ داده است.

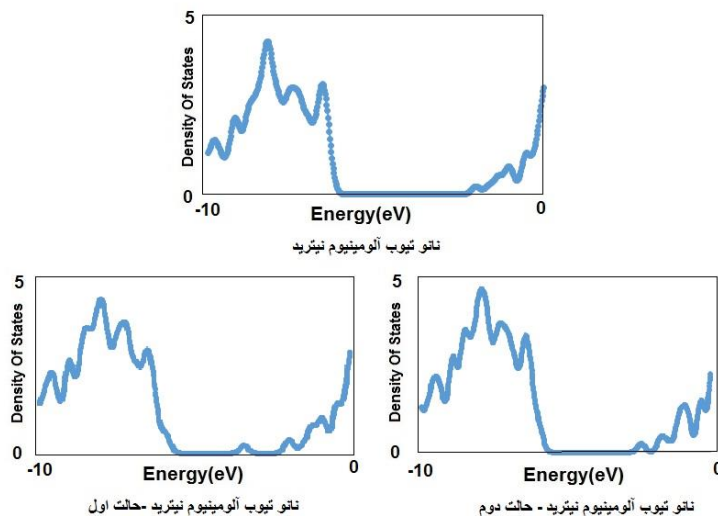
ESP ساختار مورد نظر و میزان پراکندگی بار الکترون را نشان می‌دهد؛ ناحیه آبی بار، مثبت و ناحیه قرمز بار، منفی است. با رسم ساختار ESP حالت‌های پایدار در مقدار زمان کمتر قابل پیش‌بینی است و پس از محاسبات پراکندگی بارها بر روی نانولوله آلومینیوم- نیتريد است. پس از محاسبات پراکندگی بارها روی مولکول اسید فولیک است. شکل (۱۱). نمودارهای DOS (روی این دیگرام میزان شکاف انرژی را نشان می‌دهد). شکل (۱۲). باتوجه به نتایج جدول (۴)، در حالت (الف) بار انتقالی ۱/۲۲ است که

نشان می‌دهد سطح انرژی فرمی (چگالی حالت‌های جذب- نمودار DOS) در مولکول فولیک اسید بر روی نانولوله آلومینیوم- نیتريد در ساختارهای HOMO و LUMO، نسبت به حالت (ب) که بار انتقالی آن ۲/۱۶ است و همچنین نسبت به نانولوله آلومینیوم به تنهایی که بار انتقالی آن ۱/۷۵ است، کمتر است. شکل (۱۲). این مقدار نشان‌دهنده آن است که ساختار حالت (الف) بهینه‌تر و پایدارتر و رساناتر است و همچنین، جذب مولکول فولیک اسید بر روی ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد در حالت HOMO میزان پراکندگی بار روی نانولوله بیشتر است (شکل‌های (۵) و (۸)). در حالت LOMO میزان پراکندگی بار روی اسید فولیک بیشتر است، پس HOMO در حالت (الف) پایدارتر و بهینه‌تر است (شکل‌های (۶) و (۷)). در جدول‌های (۳) و (۴)، داده‌های هندسی ساختارها و داده‌های انرژی جذب، مقدار بار منتقل شده و سطوح انرژی حالت‌های HOMO و LUMO درج شده است. ممان دوقطبی میزان قطبیت در مولکول را بیان می‌کند و از عدم پراکندگی یک‌نواخت بار ناشی می‌شود.



شکل ۱۱. جذب مولکول فولیک اسید بر روی نانولوله آلومینیوم- نیتريد ESP حالت های پایدار.

Figure 11. Adsorption of folic acid molecule on aluminum-nitride nanotube.



شکل ۱۲. چگالی حالت های جذب مولکول فولیک اسید بر روی نانولوله آلومینیوم- نیتريد.

nanotube. Figure 12. Density of absorption states of folic acid molecule on aluminum-nitrid

به علت افزایش رسانای بستر حالت (الف) میزان درصد حساسیت

۴۳/۵ است. جدول های (۳) و (۴).

مقایسه شکاف انرژی در اسید فولیک با نانولوله آلومینیوم- نیتريد چنین است که شکاف انرژی در نانولوله آلومینیوم- نیتريد همراه با اسید فولیک بیشتر از نانولوله آلومینیوم- نیتريد به تنهایی است. در اسید فولیک تنها، انتقال الکترون از HOMO به LUMO سخت تر انجام شد؛ بنابراین، در نانولوله آلومینیوم- نیتريد همراه با اسید فولیک واکنش پذیری بیشتر است. این اختلاف دو سطح انرژی HOMO و LUMO هرچه بیشتر شود، انتقال الکترون از HOMO به LUMO سخت تر می شود، در نتیجه واکنش پذیری کمتر می شود حالت (ب) و این اختلاف دو سطح انرژی HOMO و LUMO هرچه کمتر شود، انتقال الکترون از HOMO به LUMO آسان تر می شود حالت (الف)، در نتیجه واکنش پذیری حالت (الف) بیشتر است و ساختار حالت (الف) بهینه تر و پایدارتر است. شکل (۱۲). هم چنین، جذب مولکول فولیک اسید بر روی ساختار نانولوله آلومینیوم- نیتريد،

۶. نتیجه گیری

باتوجه به شکاف انرژی نانولوله آلومینیوم- نیتريد که مقدار آن ۴/۳۲ است، پس از محاسبات، اختلاف شکاف انرژی Δ_{Gap} در حالت (الف) عدد ۱/۸۸ به دست آمد و اختلاف شکاف انرژی حالت (ب) عدد ۰/۷۶ به دست آمد؛ این اختلاف شکاف انرژی در هر دو حالت، نشان دهنده میزان فعالیت و برهم کنش در حالت های HOMO و LOMO است و میزان فعالیت بیشتر در حالت (الف) نشان دهنده این است که ساختار (الف) پایدارتر و بهینه تر است. هم چنین، شکاف انرژی نانولوله آلومینیوم- نیتريد با جذب اسید فولیک از ۴/۳۲ به ۲/۴۴ رسید و از حالت نیمه رسانا به حالت رسانا رسید که این بستر می تواند برای اسید فولیک، انتخابی مناسب برای سنسور یا تشخیص دهنده اسید فولیک باشد. شکاف انرژی نانولوله آلومینیوم- نیتريد به تنهایی ۴/۳۲ است، شکاف انرژی نانولوله به همراه اسید فولیک عدد ۲/۴۴ شد، در نتیجه اگر شکاف انرژی کمتر شود، ساختار رسانا تر و درصد حساسیت بیشتر می شود که

- Preparation, characterization, and application as chemical sensors. *Progress in Materials Science*, 54(1), 15-31.
- [12] Kim, K., & Park, S. J. (2011). Influence of glyceryl palmitostearate on release behaviors of hydroxypropyl cellulose microcapsules containing indomethacin by W/O emulsion. *Macromolecular Research*, 19(9), 1121-1126.
- [13] Doust Mohamad, M. (2018). Cycloaddition to buckminsterfullerene C60: Advancements and future prospects. *Russian Chemical Bulletin*, 51(4), 367-443.
- [14] Aubi, N. L., Hadipour, M., Kamfiroozi, Z., & Bagheri, Z. (2005). Theoretical study of aluminum and BC3N nanotubes for chemical sensing of formaldehyde. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 106(2-3), 1025-1029.
- [15] An, A. G., & Eun, G. C. (2012). A study on doping and doubletensing defect of the structures of BC3N nanotubes. *Chemical Physics Letters*, 112(4-5), 2241-3242.
- [16] Saleh, A., Aslanzadeh, S., & Soleymanabadi, H. A. (2022). Methanol-sensing characteristics of zinc oxide nanotubes: Quantum chemical study. *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly*, 145(10), 1253-1257, [In Persian].
- [17] Shadi, J. (2022). Reduced HOMO-LUMO gap as an index of kinetic stability for polycyclic aromatic hydrocarbons. *Journal of Physical Chemistry A*, 103(5), 7487-7495.
- [18] Ronaghi, M. (2014). Mechanochemical reaction of aluminum and organic compounds for the synthesis of nanostructured aluminum nitride and carbon nanotubes. PhD Thesis, Ferdowsi University of Mashhad, Faculty of Engineering, [In Persian].
- [19] Morales, M., Ruiz, M., Lopez, G., & Gallardo, V. (2010). Development of oral suspensions of microparticles of ethylcellulose with tramadol. *Drug Development and Industrial Pharmacy*, 36(8), 885-892.
- [20] Vueba, M., Batista de Carvalho, L., Veiga, F., Sousa, J., & Pina, E. (2006). Influence of cellulose ether mixtures on ibuprofen release. *Pharmaceutical Development and Technology*, 11(2), 213-228.
- [21] Citation, Y. (2016). Swelling/floating capability and drug release characterizations of gastroretentive drug delivery system based on a combination of hydroxyethyl cellulose and sodium carboxymethyl cellulose. *PLOS ONE*, 10(1), e0116914.
- [22] Najafi Moghaddam, P., Ensafi Aval, M., & Fareghi, A. R. (2014). Modification of cellulose by graft polymerization for use in drug delivery systems. *Colloid and Polymer Science*, 292(1), 77-84, [In Persian].
- درحالت HOMO باتوجه به میزان پراکندگی بار روی نانولوله بیشتر است. در هردو حالت (الف) و (ب)، ولی باتوجه به نتایج، ساختار HOMO درحالت (الف) پایدارتر و بهینه تر است. شکل های (د) و (ه) و جدول های (۳) و (۴).

مراجع

- [1] Aricò, A. S., Bruce, P., Tarascon, J. M., & van Schalkwijk, W. (2005). Nanostructured materials for advanced energy conversion and storage devices. *Nature Materials*, 4(5), 366-377.
- [2] Konstantatos, G., & Sargent, E. H. (2010). Nanostructured materials for photon detection. *Nature Nanotechnology*, 5(6), 391-400.
- [3] Samadzadeh, M., & Gorgani, S. S. (2015). Design of a new dihedral-angle-controlled molecular scissors: A DFT investigation. *Journal of Structural Chemistry*, 56 (8), 1290-1294, [In Persian].
- [4] Farahbakhsh, A., Kmel Rahimi, S., Niazmand, A., & Abaszadegan, S. Razmi, S. (2011). Use of single-walled carbon nano-carbon in the manufacture of glucose biosensor. *Journal of Iranian Chemical Engineering*, 57, 23-24, [In Persian].
- [5] Zhuiykov, S., Wlodarski, W., & Li, Y. (2001). Nanocrystalline V₂O₅-TiO₂ thin-films for oxygen sensing prepared by sol-gel method. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 77(2-3), 484-492.
- [6] Chang, H., Lee, J. D., Lee, S. M., & Lee, Y. H. (2001). Adsorption of NH₃ and NO₂ molecules on carbon nanotubes. *Applied Physics Letters*, 79 (22), 3863-3871.
- [7] Lu, J., Nagase, S., Maeda, Y., Wakahara, T., Nakahodo, T., Akasaka, T., Yu, D., Gao, Z., Han, R., & Ye, H. (2005). Adsorption configuration of NH₃ on single-wall carbon nanotubes. *Chemical Physics Letters*, 405(1-3), 90-101.
- [8] Santucci, S., Picozzi, S., Di Gregorio, F., Lozzi, L., Cantalini, C., Valentini, L., Kenny, J. M., Delley, B. (2003). NO₂ and CO gas adsorption on carbon nanotubes: Experiment and theory. *Journal of Chemical Physics*, 119(19), 10904-10100.
- [9] Lee, D. S., Han, S. D., Lee, D. D., & Son, Y. M. (1998). Fabrication and NO_x sensing characteristics of WO₃ doped with SnO₂ and Pt thick film devices. *Journal of Korean Sensor Society*, 5(1), 47-89.
- [10] Korotcenkov, G. (2006). Metal oxides for solid-state gas sensors: What determines our choice. *Materials Science and Engineering B: Solid State Materials for Advanced Technology*, 139(1-2), 15-27.
- [11] Comini, E., Baratto, C., Faglia, G., Ferroni, M., Vomiero, A., & Sberveglieri, G. (2011). Quasi-one dimensional metal oxide semiconductors:

- [23] Rokhade, A., Agnihotri, S., Mallikarjuna, N., Kulkarni, V., & Aminabhavi, T. M. (2006). Semi-interpenetrating polymer network microspheres of gelatin and sodium carboxymethyl cellulose for controlled release of ketorolac tromethamine. *Carbohydrate Polymers*, 65, 243-252.
- [24] Ozeki, T., Yuasa, H., & Okada, H. (2005). Controlled release of drug via methylcellulose-carboxyvinyl polymer interpolymer complex solid dispersion. *AAPS PharmSciTech*, 6, 231-236.
- [25] Amaral, M., Sousa Lobo, J., & Ferreira, D. (2001). Effect of hydroxypropylmethyl cellulose and hydrogenated castor oil on naproxen release from sustained-release tablets. *APS PharmSciTech*, 2, 1-8.
- [26] Zhuykov, S., Wlodarski, W., & Li, Y. (2001). Nanocrystalline V_2O_5 - TiO_2 thin-films for oxygen sensing prepared by sol-gel method. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 77, 484-492.
- [27] Peralta-Inga, Z., Lane, Z., Murray, P., Boyd, J. S., Grice, S., O'Connor, M. E., & Politzer, P. (2020). Characterization of surface electrostatic potentials of some (5,5) and (n,1) carbon and boron/nitrogen model nanotubes. *Nano Letters*, 3, 21-25.
- [28] Glendening, E. D., Landis, C. R., & Weinhold, F. (2013). NBO 6.0: Natural bond orbital analysis program. *Journal of Computational Chemistry*, 34(16), 1429-1437.
- [29] Jissy, A. K., & Datta, A. (2012). Effect of external electric field on H-bonding and π -stacking interactions in guanine aggregates. *Chemical Physical Chemistry*, 13(14), 4163.
- [30] Miyamoto, Y., Rubio, A., Cohen, M. L., & Louie, S. G. (1994). Electronic properties of tubule forms of hexagonal BC₃. *Physical Review B*, 50, 4976-18360.
- [31] Boulanger, L., Andriot, B., Cauchetier, M., & Willaime, F. (1995). Concentric shelled and plate-like graphitic boron nitride nanoparticles produced by CO₂ laser pyrolysis. *Chemical Physics Letters*, 234, 227-232.