بررسی محاسباتی جذب آدنین و گوانین بر نانوحسگر اکسید مس-گرافن

میرزایی بابلقانی، فاطمه؛ محمدی‌منش، ابراهیم

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، کیلومتر ۵ جاده اراک، ملایر

چکیده

جذب آدنین و گوانین بر صفحات گرافن خالص و گرافن آلاییده به اکسید مس (Cu_2O-GS) با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شد. این کار نشان داد که نانوساختار اکسید مس- گرافن، آدنین و گوانین را با جذب بسیار قوی در مقایسه با گرافن خالص شناسایی می‌کند. همچنین پیکربندی اکسید مس-گرافن و اتم‌های کربن در مولکول آدنین و گوانین، برهم کنش قوی با یکدیگر دارند.

A computational investigation of Adenine and Guanine adsorption on Cu_2O-GS nanosensor

Fatemeh, Mirzai Babolghani; Ebrahim, Mohamadi-Manesh

Department of Physics, University of Malayer

Abstract

Adsorptions of adenine and guanine on pure, and Cu_2O decorated graphene sheets (Cu_2O-GS) were investigated, using density functional theory. This work revealed that the Cu_2O-GS nanostructure were more highly sensitive to adenine and guanine adsorption than that of pristine graphene sheets. Also, the Cu_2O-GS configuration displayed the strongest interaction with carbon atoms of adenine and guanine molecule.

PACS; 71, 10

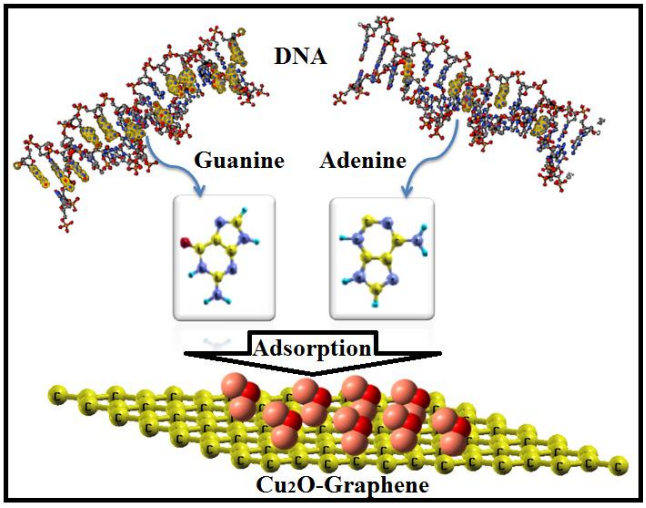
مقدمه

نانوحسگرها یکی از ابزارهای اساسی برای شناسایی مواد زیستی است. در سال های اخیر تلاش برای تولید زیست حسگرهای مبتنی بر فناوری نانو توسعه چشمگیری یافته است. سرعت، دقت و حساسیت بالا سه ویژگی عمده این نوع حسگرها به شمار می‌رود. زیست حسگرها در علوم پزشکی و درمانی، بیوتکنولوژی، فیزیک، شیمی، حمل و نقل هوایی، کنترل محیط زیست و ایمنی کاربرد دارند[۱]. تاکنون انواع مختلفی از نانوحسگرهای زیستی برای شناسایی دئوکسی ریبو نوکلئیک اسید[1] (DNA)، ریبو نوکلئیک اسید[2] (RNA)، آدنین و گوانین بعنوان دو تا از ترکیبات پایه‌ای DNA، اسید نوکلوئیک، قند خون، پروتئین واسیدهای آلی ساخته شده‌اند[٤-۲]. برای ساخت زیست حسگرها تاکنون، ترکیباتی مانند نانو ساختارهای مبتنی بر اکسید مس، پلاتین- اکسید مس و اکسید روی بعنوان زیست حسگر مورد استفاده قرار گرفته است[۷-۵]. در دهه اخیر با شناسایی و تولید گرافن و خواص منحصر به فرد این ساختار دو بعدی تلاش‌ها برای استفاده از گرافن بعنوان زیست حسگر نیز آغاز گردید. در طی این سال‌ها، زیست حسگرهای فراوانی بر پایه گرافن ساخته شده است. از آنجایی که گرافن خالص قابلیت ضعیفی برای شناسایی سلول‌های زیستی از جمله آدنین و گوانین دارد[۳] عمدتاً از گرافن آلاییده شده به اتم‌ها و اکسیدهای فلزی برای ساخت زیست حسگرها استفاده می‌شود. بر اساس مقالات منتشر شده، گرافن آلاییده شده به اتم‌های پلاتین، مس، طلا، اکسید مس، اکسید روی، پالادیوم، اکسید نیکل و مواد آلیاژی برای شناسایی قند خون، آفت کش‌ها، تشخیص پروتئین و شناسایی آنزیم بکار گرفته شده

[1] Deoxyribonucleic acid
[2] Ribonucleic acid

است[۲]. نتایج تحقیقات حکایت از قابلیت بالای این ترکیبات مبتنی بر گرافن برای شناسایی سلول‌های زیستی دارد.

در این مقاله با توجه به خواص گرافن و نیمه رسانای اکسیدمس (Cu_2O)، نانوساختار اکسیدمس-گرافن بعنوان یک زیست حسگر برای شناسایی ساختار پایه DNA (آدنین[3] و گوانین[4]) بررسی شد. محاسبات لازم بر اساس نظریه تابعی چگالی انجام شده است. از آنجایی که DNA از چهار پایگاه آدنین، گوانین، سیتوزین، تیمین تشکیل شده است و تفاوت‌های اصلی در عملکرد و واکنش ساختار DNA در شرایط مختلف، از طریق دو ساختارآدنین و گوانین مشخص می‌شود و بروز هر گونه تغییرات غیر طبیعی و یا جهش در این ساختارها نشان از بیماری‌های مختلف است[٤]. بر این اساس به بررسی اثرات جذب آدنین و گوانین بر نانوساختار اکسید مس- گرافن پرداخته شده است. شماتیک این نانوساختار برای شناسایی آدنین و گوانین در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: شماتیک زیست حسگر گرافن-اکسیدمس برای شناسایی آدنین‌وگوانین همراه با ترکیب شیمیایی این ساختارها

شرایط محاسبه

در این مجموعه از محاسبات، هندسه اتمی و ساختار الکترونی بر اساس نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از بسط تابع موج تخت و بسته نرم‌افزاری QUANTUM ESPRESSO انجام شده است[۸]. برای محاسبه انرژی تبادلی- همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته GGA با تابعی PBE استفاده شد. وانرژی جنبشی قطع بسط امواج تخت، برای تابع موج و چگالی بار مقادیر ٤٥ و ۳۲۰ ریدبرگ بهینه‌سازی شد. سیستم مورد مطالعه ابریاخته گرافنی با ۹۸ اتم کربن، مولکول اکسید مس (۳ اتم)، آدنین (۱۵ اتم) و گوانین (١٦ اتم) می‌باشد. برای جلوگیری از برهم کنش صفحات مجاور گرافن بر ترکیبات جذب شده، خلا بین صفحات ٢٤ آنگسترم در نظر گرفته شد. همچنین انتگرال‌گیری در منطقه اول بریلوئن با مش‌بندی به روش MONKHORST-PACK و با نقاط K به تعداد ۱×٦×٦ در نظر گرفته شده است.

در این مجموعه محاسبات، محتمل‌ترین حالت‌های نزدیک شدن آدنین و گوانین به صفحه گرافن خالص و گرافن آلاییده شده به اکسیدمس به طور جداگانه مورد بررسی قرار گرفته است. مطابق شکل سه حالت برای آدنین و سه حالت برای گوانین در نظر گرفته شد و جذب آنها بر ساختار بهینه شده گرافن خالص (GS) و بهینه‌ترین ساختار گرافن آلاییده به اکسید مس (Cu_2O-GS) بررسی شد[۹].

انرژی جذب سطحی برای همه پیکربندی‌های ممکن با استفاده از رابطه ۱ محاسبه شده است.

$$E_{bind}=E_{total}-(E_{GS\ or\ Cu2O\text{-}GS}+E_{Adenine\ or\ Guanine}) \quad (۱)$$

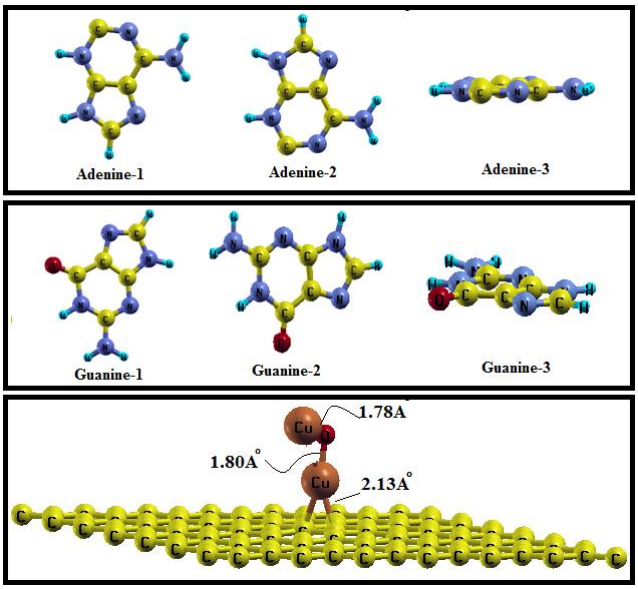
در این رابطه E_{total} انرژی کل بعد از جذب مولکول آدنین یا گوانین بر زیست حسگر، $E_{GS\ or\ Cu2O\text{-}GS}$ انرژی کل صفحه گرافن خالص یا گرافن- اکسید مس $E_{Adenine\ or\ Guanine}$ انرژی آدنین یا گوانین می‌باشد.

نتایج و بحث

ابتدا به منظور اطمینان از صحت نتایج محاسبات، آدنین و گوانین را به صفحه گرافن خالص نزدیک کرده و نتایج حاصل را با نتایج گزارش شده مقایسه کرده‌ایم[۲]. با نزدیک شدن آدنین و گوانین به صفحه گرافن خالص، انرژی جذب سطحی برای آدنین در سه حالت Adenine-1، Adenine-2 و Adenine-3 به ترتیب

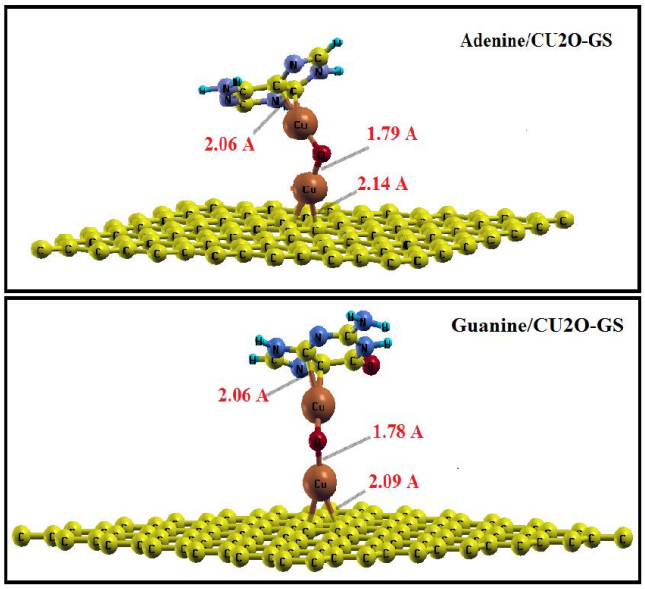
[3] *Adenine*
[4] *Guanine*

مقادیر ۰/۰۹-، ۰/۰۸- و ۰/۱۱- الکترون ولت و انرژی جذب سطحی برای Guanine-1 و Guanine-3 به ترتیب مقادیر ۰/۰۲۷- و ۰/۰۷- الکترون ولت محاسبه شده است. برای حالت نزدیک شدن گوانین در وضعیت Guanine-2 جذب بر گرافن خالص صورت نگرفت. بر این اساس، بهینه‌ترین ساختار به نزدیک شدن آدنین و گوانین به صورت موازی با صفحه گرافن (Guanine-3 و Adenine-3) اختصاص دارد. برای این دو حالت بهینه نتایج محاسبات حاضر با نتایج گزارش شده در توافق می‌باشد[۲].



شکل ۲: حالتهای مختلف برای نزدیک شدن آدنین گوانین به صفحه گرافن آلاییده به اکسید مس و گرافن خالص و نمایش نانوساختار بهینه اکسید مس- گرافن خالص (Cu_2O-GS).

جذب آدنین و گوانین بر بهینه‌ترین ساختار اکسید مس- گرافن حکایت از جذب خوب این ترکیبات بر نانو حسگر اکسید مس- گرافن دارد. همان‌گونه که در شکل ۳ مشاهده می شود، آدنین و گوانین با مس پیوند برقرار می کند. انرژی پیوند بهینه‌ترین حالت جذب آدنین بر نانوساختار اکسید مس- گرافن ۰/۸٤- الکترون ولت و انرژی جذب گوانین ۰/۸۲- الکترون محاسبه شد که این مقادیر در مقایسه با جذب آدنین بر گرافن خالص بیش از ۷ برابر و برای گوانین بر گرافن خالص بیش از ۱۱ برابر افزایش یافته است.



شکل ۳: ساختار بهینه حاصل از جذب آدنین وگوانین بر زیست حسگر گرافن- اکسیدمس و طول پیوندها بعد از بهینه سازی ساختار.

همان‌گونه که در شکل مشاهده می‌شود، آدنین و گوانین از طرف اتم‌های کربن با مس پیوند نسبتاً خوبی تشکیل می‌دهند که طول پیوندهای تشکیل شده در شکل ۳ نشان داده شده است. به این ترتیب با جذب اکسید مس بر گرافن خالص قابلیت این ترکیب برای شناسایی آدنین و گوانین در مقایسه با گرافن خالص افزایش چشمگیری می‌یابد و می‌توان از این ساختار به عنوان حسگری برای شناسایی ترکیبات پایه DNA استفاده کرد.

نتیجه گیری

در این مقاله جذب آدنین و گوانین بر گرافن و گرافن آلاییده به اکسید مس با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شد. نتایج نشان داد، نانو ساختار اکسید مس- گرافن قدرت زیادی برای شناسایی آدنین و گوانین در مقایسه با گرافن خالص دارد. انرژی جذب آدنین بر گرافن خالص برای بهینه‌ترین حالت ۰/۱۱- الکترون ولت و انرژی جذب آدنین بر اکسید مس- گرافن ۰/۸٤- الکترون ولت محاسبه شد که بیش از هفت برابر قدرت جذب در اکسید مس- گرافن افزایش یافته است. همچنین بر اساس این محاسبات انرژی جذب گوانین بر گرافن خالص ۰/۰۷- الکترون

ولت و بر اکسید مس- گرافن ۰/۸۲- الکترون ولت محاسبه گردید که این نیز بیش از ۱۱ برابر افزایش را نشـان مـی‌دهـد. ایـن نتـایج بیانگر آن است که آلاییده کردن گرافن بـه اکسـید مـس منجـر بـه افزایش قابلیت جذب گرافن برای شناسایی DNA مـی‌شـود و بـه این ترتیب می‌توان نانوساختار اکسید مس- گرافن را بعنـوان یـک زیست حسگر برای شناسایی DNA معرفی کرد.

مرجع‌ها

[1] V. Yang and T. Ngo, *"Biosensore and their apphications", Book*, (2000) ch. 2.

[2] L. Jingquan and L. Zhen, C. J. Barrow and W. Yang, "*Molecularly engineered graphene sueface for sensing application: Areview", Analytica Chimica Acta* ***859,*** (2015) 1–19.

[3] H. H. Gureland and B. Salmankurt ,"*Graphene Based Biosensore", AIP* **1722**, (2016) 080004.

[4] T. Premkumar and K. E. Geckeler, "*Graphene–DNA hybrid* matterials: Assembly, Applications and Prospects: A review*" Progress in Polymer Science* ***37*** ,(2012) 515–529.

[5] J. Chomouka and J. Prasek, P. Businova and L. Trukova and J. Drbolavova and et al., "*Novel Electrochemical Biosensore for Simultaneous Detection of Adenine and Gaunine Based on* Cu_2O *Nanoparticles" Procedia Engineering* **47**, (2012) 702 – 705.

[6] P. Nayak and B. Anbarasan and S. Ramaprabhu "*Fabrication of Organ phosphorus Biosensore Using ZnO Nanoparticle-Decorated Carbon Nanotube-Graphene Hybrid Composite" Phys. Chem*. C **117**, (2013) 13202-09.

[7] K. Dhara, J. Stanley, T. Ramachandran and B. G. Nair, " Pt-CuO Nanoparticles decorated reduced graphene oxide for the fabrication of highly sensitive non-enzymatic disposable glocase sensore ", *Sensors and Actuators B* **195**, (2014) 197–205.

[8] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car and C. Cavazzoni and et al,"*Quantumespresso,Condensed*", *Condensed Matter* **21**, (2009) 395502-39521.

[9] E. Mohammadi-Manesh, M. Vaezzadeh and M. Saeidi, "Theoretical study on electronic structure, and electrical conductance at room temperature of Cu_2O–GS nanosensors and detection of H_2S gas*", Computational Materials Science* **97**, (2015) 181-185.