

بررسی جذب سطحی داروی سرتالین بر نانوقفس فولرن به عنوان حامل داروهای ضد افسردگی

آلا صفامنش، سید علی احمدی*، عنایت اله شیخ حسینی و دادخدا غضنفری

گروه شیمی، واحد کرمان، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمان، ایران

چکیده

سرتالین یک داروی ضد افسردگی است که برای درمان افسردگی، حملات پانیک، اختلال وسواس فکری، اختلال استرس پس از سانحه، اختلال اضطراب اجتماعی، اختلال بدشکلی بدن و PMS شدید استفاده می شود. در کار حاضر ویژگی های مربوط به واکنش پذیری و ساختار شیمیایی مرتبط با خصوصیت دارویی، داروی ضد افسردگی سرتالین، در فرایند جذب سطحی سرتالین بر روی فولرن (به عنوان جاذب) در فاز گازی با استفاده از DFT/ B3LYP/6-311+G (d, p) بدست آمده است. پدیده جذب روی مولکول فولرن به صورت شیمیایی مورد بررسی قرار گرفته است و انرژی جذب محاسبه شده است. محاسبات ساختار شیمیایی از جمله (ممان دو قطبی)، ویژگی های ترمودینامیکی شامل (انرژی آزاد گیبس، آنتالپی، آنتروپی و همینطور ظرفیت ترمودینامیکی) و همچنین، پارامترهای الکترونیکی مانند $(\sigma_p, \omega, \chi \text{ and } \eta)$ که موثر در توجیه رفتار شیمیایی ترکیب هستند، محاسبه شده است. محاسبات پایداری و قابلیت واکنش پذیری توسط انرژی های HOMO و LUMO سرتالین نیز محاسبه شده اند. پنج ناحیه فعال شیمیایی برای سرتالین یافت شده است که پایداری ترمودینامیکی در تمامی آن ها نشان داده شده است. این جذب سطحی به انتقال سرتالین به سیستم های زیستی کمک می کند.

واژه های کلیدی: سرتالین، C60، فولرن، فعالیت شیمیایی، DFT

ایمیل نویسنده مسئول: saahmadi@iauk.ac.ir

۱-مقدمه

سیستم های تحویل نانو ذرات دارویی فناوری های مهندسی هستند که از نانوذرات برای تحویل هدفمند و کنترل تولید داروهای درمانی استفاده می کنند. شکل مدرن یک سیستم تحویل دارویی باید عوارض جانبی را به حداقل برساند و میزان دوز و دوز مصرفی را کاهش دهد. به تازگی، نانوذرات به دلیل کاربرد بالقوه آنها برای تحویل مؤثر دارو، مورد توجه قرار گرفته اند [1]. نانومواد خواص شیمیایی و فیزیکی متفاوت یا اثرات زیستی را نسبت به هم تایان بزرگتر، ارائه می دهند که می توانند برای سیستم های تحویل دارو مفید باشند. برخی از مزایای مهم نانوذرات عبارتند از: نسبت بالای سطح به حجم، قابلیت شبیه سازی شیمیایی و هندسی و توانایی آنها برای تعامل با مولکول های زیستی برای تسهیل جذب در غشای سلولی [2]. نانو ذرات شامل یک خانواده بزرگ از مواد آلی و معدنی می شود. هر ماده دارای ویژگی های قابل تنظیم منحصر به فرد است. بنابراین، می تواند به صورت انتخابی برای کاربردهای خاص طراحی شده باشد نانوذرات به شکلهای نانولیپوزوم، نانولوله های کربنی، نانوفیبرها، نانوکره ها برای حامل های دارو و ساخت داربست سلولی کاربرد گسترده ای داشته اند [3]. نانوذرات استفاده شده برای انتقال دارو شامل انواع ساختارها با اندازه، شکل و مواد متفاوت هستند که هرکدام ظرفیت بارگیری

دارو، آزادسازی، هدفگیری سلولی و پایداری متفاوت دارند [4]. در بین انواع موادی که به عنوان نانوذرات در انتقال دارو نقش دارند، نانولوله های کربنی تک جداره هستند که به دلیل خصوصیت فیزیکوشیمیایی منحصر بفرد و مسمومیت پایین، نقش موثرتری در انتقال دارو در بیماران سرطانی نشان داده اند [5, 6]. نانولوله های کربنی تک دیواره به صورت یک صفحه ی گرافیت میباشند که تاخورده و به صورت سیلندری با قطر ۱/۲ تا ۱/۴ نانومتر درمی آیند. در این ساختار، اتمهای کربن، در یک قالب شش وجهی بطور منظم به یکدیگر متصلند. نانولوله های کربنی تک دیواره، همانند فلزات عمل می کنند و الکتریسیته و گرما را بخوبی هدایت مینمایند. این نانولوله های تک جداره، می توانند با مولکول های زیستی متفاوتی به صورت کووالانسی و یا غیرکووالانسی اتصال پیدا کنند. سپس، این کمپلکس بوسیله ارگان های درون سلول جذب می شود [7]. نانولوله های کربنی تک دیواره به عنوان ساختارهای تک بعدی در ابعاد نانو هستند، که با خصوصیات منحصر بفردشان در فرآیند ژن تراپی نقش دارند، به طوری که با تسهیل در انتقال ژنهای p53، به عنوان حامل دارو به کار می روند و با این امر منجر به افزایش فعالیت آپوپتوسیس سلولی می شوند. همچنین، این نانولوله ها، توانایی نفوذ و اثر گذاشتن در غشای سلولی را دارند [8-10].

۲- روشهای محاسبات

ساختارهای داروی سرترالین، فولرن و کمپلکس آنها با محاسبه های کوانتوم مکانیکی با استفاده از نرم افزار گوسین ۰۳ [22] بهینه سازی شدند مولکولها با استفاده از روشهای DFT در سطح B3LYP با همراه مجموعه پایه 6-311+g (d, p) بهینه سازی شدند. انرژی E_{ads} (رابطه ۱) جذب داروی سرترالین روی فولرن در برهم کنش نانوساختار- دارو محاسبه شد در ادامه پارامترهای شیمی کوانتومی متفاوتی همانند سختی شیمیایی (η) که به عنوان معیاری از مقاومت گونه ی شیمیایی در برابر تغییر آرایش الکترونی، پتانسیل شیمیایی (μ) معیاری از تمایل سیستم به از دست دادن ابر الکترونی، شاخص الکتروفیلیسیته (ω) میزان پایداری انرژی سیستم طی انتقال بار با اطرافش، محاسبه شدند.

رابطه ۱:

$$E_{ads} = E(B-Ser) - (E_{Sertraline} + E_{Buckyball})$$

۳- تجزیه و تحلیل نتایج

بر مبنای نتایج به دست آمده در مقالات پیشین، تطبیق قفسه نانو با اتمهای فلزی دارای توان بالقوه برای اصلاح ویژگیهای الکتریکی به روشی بهینه در راستای فعالیتهای شیمیایی است و دارای توان بالقوه برای واکنش است. بنابراین در این تحقیق روش کوانتومی B3LYP/6-311+G (d, p) برای بهینه کردن تمامی ساختارها شامل سرترالین و فولرن و سرترالین قرار گرفته شده بر فولرن استفاده شده است. ساختار بهینه شده سرترالین در شکل ۱ نشان داده شده است. سرترالین دارای ۵ ناحیه فعال شیمیایی است. یک اتم N، دو اتم O و دو حلقه فنیل وجود دارد که همگی محلهای شیمیایی و همینطور الکتروشیمیایی متفاوتی را در سرترالین نشان می دهند. محلهای فعال کلی سرترالین در شکل ۲ نشان داده شده است. اثرات گوناگونی همراه با چگالی الکترون بر روی واکنشهای شیمیایی در هر محل است. رفتارهای بهتر را می توان در فاز گاز در زمانی که حلقه فنیل حضور دارد به دست آورد.

نانولوله های کربنی، صفحات گرافیتی هستند که به صورت استوانه های توخالی یکپارچه، پیچیده شده اند [11]. این نانولوله های کربنی شامل دو نوع، نانولوله های تک دیواره و نانولوله های چند دیواره هستند که به ترتیب در سالهای ۱۹۹۱ و ۱۹۹۳ کشف شدند. نانولوله های تک دیواره، ساده ترین هندسه را داشته و قطر آن ها در حدود ۰/۸ تا ۲ نانومتر است در حالی که نانولوله های چند دیواره از چندین استوانه ی هم محور تشکیل شده اند که قطر آن ها به بیش از ۱۰۰ نانومتر می رسد. نانولوله هادر حقیقت لایه های گرافیتی هستند که از دو نقطه به هم وصل شده اند [12].

شیمی محاسباتی شاخه ای از شیمی نظری است که می تواند ساختار، انرژی و دیگر خصوصیات شناخته شده یا نشده مولکولها را پیش گویی کند. برای انجام محاسبات باید از کامپیوترهای رقمی استفاده کرد که سیستمهای شیمیایی را شبیه سازی می نمایند. از طرف دیگر، تمام روشهای محاسباتی برای مطالعه یک مولکول مناسب نیست. پس در ابتدا باید یک روش نظری مناسب را برای مطالعه یک مولکول انتخاب نمود. در شیمی محاسباتی، سیستمهایی که به طور دقیق قابل حل هستند، عبارتند از سیستمهای تک ذره ای یا دو ذره ای که سیستم دو ذره ای با استفاده از دستگاه مختصات مرکز جرم می تواند به دو مسئله تک ذره ای تبدیل شود. در مورد سیستمهای چند ذره ای محاسبات ریاضی بسیار پیچیده و طولانی مورد نیاز است.

فولرن، (C60) به عنوان جاذب [13] برای چندین مواد شیمیایی سمی و غیرسمی [14] در قالبها [15] و همینطور فاضلاب [16] مورد استفاده بوده است. محاسبات نظری مطالعات میدانی شامل قفس نانو [17] همگی با استفاده از نظریه تابعیت چگالی [18] و محاسبات دینامیک مولکولی انجام شده اند [۱۹].

یکی از مواد روان گردان که در تمامی دنیا گسترده شده است، الکل است. رواج مصرف الکل در کشورها اروپایی مانند اسپانیا اخیرا در یک دوره ۱۲ ماهی در بین جمعیت ۱۵ تا ۶۴ سال به ۹۴/۱٪ رسیده است. سرترالین در مصرف تجاری دارای تأییدیه FDA برای افسردگی، توقف سیگار کشیدن و همچنین کاهش وزن است [20]. در حال حاضر، برخی اثرات این دارو نوراپی نفرین و همینطور مهار جذب مجدد دوپامین همراستا با کاتیون انتخابی حلقه Cys کانالهای یون مانند استیلکولین نیکوتینی و دریافت کننده های سروتونین نوع A (5-HT3A) است. مقالات زیادی بر روی توانایی سرترالین برای مهار کردن دریافت کننده 5-HT3A انجام شده اند که به خانواده بزرگ کانالهای یون دروازه لیگاند پنج ضلعی تعلق دارد و از استیل-کولین نیکوتینی، اسید آمینوبوتیریک-g نوع A همچنین دریافت کننده های گلوسین تشکیل شده است [21].

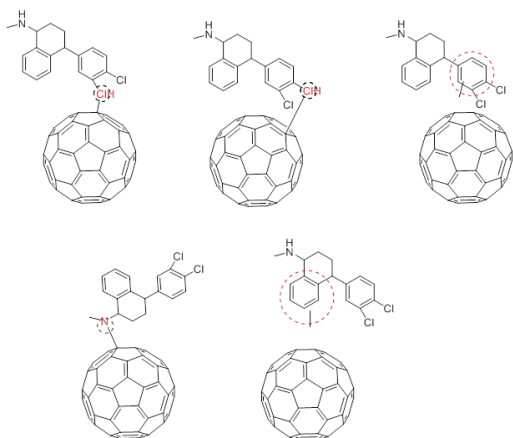
در مطالعه حاضر فولرن به عنوان جاذب سرترالین در فاز گازی مبنی بر نظریه تابعیت چگالی با مجموعه پایه 6-311+G (d, p) به کار گرفته شده است.

هادی‌های عالی می‌شود که به دلیل فاصله باند کوچک هدایت و جریان الکتریکی متعاقب حرکت الکترون است. HOMO و LUMO یک بعد جالب شیمی را تشکیل می‌دهند که دید موشکافانه‌ای در رابطه با کارکرد واکنش‌ها مطابق با اثر متقابل اوربیتال‌ها برای کنترل خروجی‌های واکنش ایجاد می‌کند. الکترون‌های ضعیف با انرژی HOMO برای درگیر کردن واکنش‌های شیمیایی تامین شده‌اند. انرژی HOMO داده شده سرتالین می‌تواند درگیری خوبی در واکنش‌های شیمیایی از خود نشان دهد در حالی که در الکترون دهنده به دلیل اتم‌های الکترون‌گاتیو (O, Cl) حاضر در ساختار شیمیایی سرتالین نقش دارند. داده‌های همراه با اوربیتال‌های مرز سرتالین (HOMO و LUMO) در جدول ۱ نشان داده شده است.

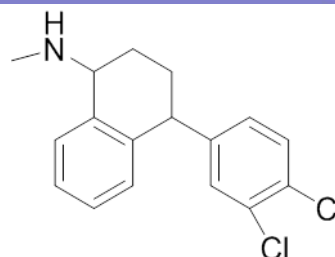
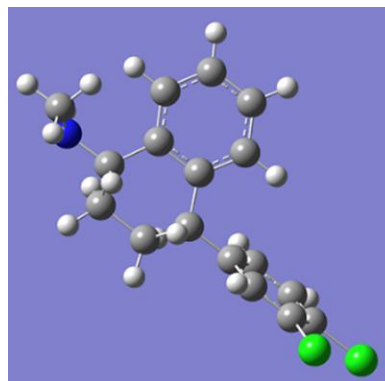
جدول ۱: داده های انرژی و مومنتوم دو قطبی سرتالین با روش B3LYP/6-311+G (d, p).

Phase	gas
Energy	-4289.17kJ
Dipole moment(Debye)	3.1057
HOMO(eV)	-۶,۳۱
LUMO(eV)	-1.10

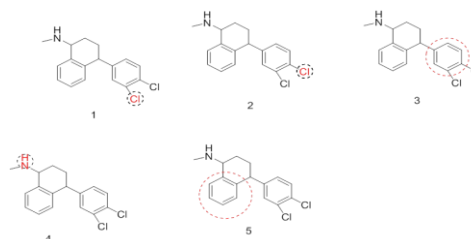
قطبیت ترکیبات در واکنش با تکانه دوقطبی معرفی شده است. بر مبنای جدول ۱، تکانه دوقطبی سرتالین برابر با 3.1057 D در فاز گاز است. چون اتم‌های الکترون‌گاتیو در ساختار شیمیایی سرتالین (N اتم) حاضر هستند، اثرات قطبی به وجود می‌آوردند.



شکل 3. پنج سایت فعال برای پذیرش C₆₀ کمپلکس سرتالین- C₆₀



شکل ۱. ساختار بهینه سرتالین با B3LYP/6-311+G (d, p)



شکل 2. موقعیتهای فعال سرتالین

انرژی HOMO و LUMO دارای نقش مهمی در واکنش-دهندگی شیمیایی است. مقادیر قابل توجهی از LUMO همراه با پذیرش بالاتر الکترون در مولکول‌هاست. انرژی HOMO و LUMO دارای توان شناسایی و پیش‌بینی قوی بودن و پایدار بودن ترکیبات شیمیایی هستند. بر مبنای انرژی اوربیتال مرزی، مانند اوربیتال‌های نزدیک با سطوح متفاوت انرژی، محلی که در آن بزرگ‌ترین تحریک الکترونی رخ می‌دهد انرژی فاصله باند HOMO و LUMO را نشان می‌دهد. به خصوص در مورد سیستم‌های آروماتیک شیمیایی بزرگ، فاصله‌های باند کوچک HOMO و LUMO منجر به محرک بودن الکترون‌های π می‌شود پس الکترون قادر است به سطح بالاتر انرژی نزدیک به سطح انرژی خود به راحتی پرش کند. انرژی در سرتاسر مولکول توزیع شده است و منجر به شرایط پایداری با محرک بودن الکترون‌های π در سیستم‌های اوربیتالی π آمیخته شده، می‌شود.

هدایت خوب محرک بودن الکترون‌های π برای سیستم‌های آروماتیک بزرگ (مانند نوارهای نانوی گرافن) منجر به نیمه-

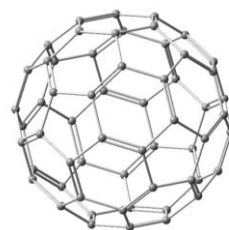
افزودن یک الکترون به اتم خنثی که به معنای اولین وابستگی الکترونی است، آزادسازی انرژی منجر به منفی بودن می‌شود. از سوی دیگر، افزودن یک الکترون به یک یون منفی که دارای دومین وابستگی الکترونی است نیاز به مقدار بیشتری انرژی دارد. این مورد منجر به وابستگی مثبت الکترون دوم به دلیل آزادسازی انرژی فشار آور از فرآیند الصاق الکترون می‌شود.

سرتالین مثبت بودن را در رابطه با انرژی وابستگی الکترونی نشان می‌دهد. به بیانی دیگر، سرتالین بیشتر تمایل دارد الکترون بدهد تا الکترون بگیرد. نظریه کوپمن برای استخراج پارامترهای واکنش مولکولی مانند الکترون‌گاتیویته (χ)، نرمی (σ)، سختی (η) و شاخص الکترون دوستی (ω) با کمک روش DFT به کار گرفته شده است. جذب توان اتم یا مولکول به دست آمده از HOMO و LUMO با مقادیر الکترون‌گاتیویته (χ) نشان داده شده است. شرایط پایدار و واکنش‌پذیر توسط σ نشان داده می‌شوند. پارامترهای واکنش‌دهندگی سرتالین هم در فازهای گاز و هم آبی در جدول ۳ نشان داده شده است. بر همین اساس، سرتالین یک حالت پایدار و واکنش‌پذیر قابل توجه در واکنش‌های شیمیایی نشان می‌دهد. سرتالین بر C60 گرفته شده است. انرژی مربوط به مجموعه‌های شکل ۳ را می‌توان در جدول ۳ و شکل ۵ مشاهده کرد، در حالی که مطابق با هر تکانه دو قطبی پیچیده، تمامی سمت‌های فعال قادر به عمل کردن بر واسطه قطبی هستند. مطابق با اتخاذ نسبی انرژی، تمامی سمت‌های فعال منجر به پایداری ساختارها در واسطه شیمیایی هستند در حالی که ساختار ۳ دارای بالاترین پایداری است. با توجه به اینکه موقعیت قرار گیری هر قسمت از داروی سرتالین (جهت گیری‌های متفاوت موقعیت‌های فعال) دارای فضای شیمیایی متفاوت و زوایای دی هدرال متفاوت می‌باشد این مورد هم در انرژی تشکیل ترکیب و هم در تولید محصول جذب به صورت کمپلکس موثر است.

جدول ۳: داده های انرژی و ممان دو قطبی کمپلکس های سرتالین - C60

compound	E(kcal/mol)	μ (D)	ΔE (ads/kJ)
۱	-2254.214	1.47	-4440.199
۲	-2751.206	1.57	-6527.565
۳	-2854.380	1.55	-6960.896
۴	-1652.693	1.88	-1913.811

شکل ۳ محل فعال سرتالین برای گرفتن C60 را نشان می‌دهد. تمامی محل‌های C60 شانس مشابهی برای شرکت در واکنش-های شیمیایی به دلیل ساختار متقارن خود C60 (ih) دارند. هیچ‌کدام از محل‌های در نظر گرفته شده تفاوتی در واکنش ایجاد نمی‌کنند. ساختار فولرن اصلی و بهینه شده در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل ۴: ساختار بهینه C60 (ih) با روش E(-B3LYP/6-311+G (d, p) 738.33kJ)

انرژی توانایی انجام کار و تامین حرارت است. انرژی پتانسیل شیمیایی را می‌توان به عنوان انرژی ذخیره شده در اتصالات شیمیایی تعریف کرد که دارای اهمیت چشم‌گیری در رابطه با ویژگی‌های ترمودینامیکی است و می‌توان آن را به دانش مواد متفاوت شامل شیمی، فیزیک، زیست‌شناسی همینطور مهندسی شیمی اعمال کرد. ممکن است که از پتانسیل شیمیایی برای محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی همراه با چنین موادی در فشار و دمای ویژه استفاده شود. به عبارتی دیگر، ممکن است چگونگی پایداری بودن مواد، ترکیبات شیمیایی و محلول‌ها مورد استفاده در پتانسیل شیمیایی و در نظر گرفتن ثابت فشار و دما را تعیین کرد. مقدار -3.70 الکترون ولت به دست آمده برای پتانسیل شیمیایی (μ) سرتالین پایداری آن را در فاز گازی نشان می‌دهد. انرژی منفی، انرژی مخفی را در اتصالات شیمیایی در راستای فعالیت آن نشان می‌دهد (جدول ۲).

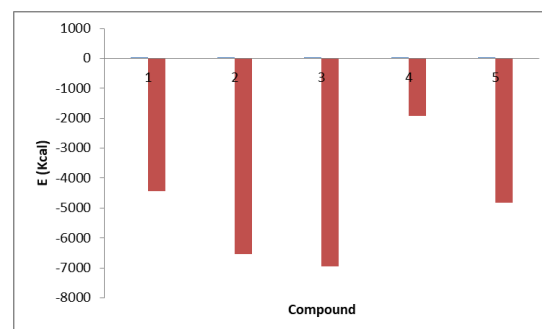
جدول ۲: داده های انرژی و ممان دو قطبی کمپلکس های سرتالین - C60 (ev).

IP	EA	μ	η	χ	σ	ω
۶,۳۱	۱,۱۰	-۳,۷۰	۲,۶۰	۳,۷۰	۰,۳۸	۲,۶۳

از دست دادن یا به دست آوردن انرژی توسط اتم به دلیل واکنش‌های شیمیایی منجر به چنین از دست دادن یا به دست آوردن انرژی تولید می‌شود. واکنش‌های گرمازا انرژی آزاد می‌کنند در حالی که واکنش‌های گرماگیر انرژی جذب می‌کنند. مورد اول (واکنش‌های گرمازا) منجر به انرژی منفی می‌شود که در نتیجه دارای علامت منفی است. گرچه مورد دوم (واکنش-های گرماگیر) با انرژی مثبت و با علامت مثبت است. در مورد

- [10] A. E. Yavuz, S. H. Bayari, N. Kazanci, Journal of Molecular Structure, 924, 313-321, (2009).
- [11] M. S. Garelli, F. V. Kusmartsev, The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems, 48, 199-206, (2005).
- [12] A. Takzare, D. D. Ghafoor, A. F. Siddiqi, S. Ravali, M. Shalbaf, M. Bakhtiar, Journal of Drug Delivery Science and Technology, 52, 818-824, (2019).
- [13] A. Ceulemans, J. T. Muya, G. Gopakumar, M. T. Nguyen, Chemical Physics Letters, 461, 226-228, (2008).
- [14] J. T. Muya, M. T. Nguyen, A. Ceulemans, Chemical Physics Letters, 483, 101-106, (2009).
- [15] S. Jo, S. Kim, B. H. Lee, A. Tandon, B. Kim, S. H. Park, M. K. Kim, International journal of molecular sciences, 19, 1895, (2018).
- [16] C. Wang, W. Huang, J. Lin, F. Fang, X. Wang, H. Wang, Chemosphere, 241, 125086, (2020).
- [17] M. Shen, W. Jia, Y. You, Y. Hu, F. Li, S. Tian, J. Li, Y. Jin, D. Han, Nanoscale research letters, 8, 1-6, (2013).
- [18] Y. Shirai, A. J. Osgood, Y. Zhao, K. F. Kelly, J. M. Tour, Nano Letters, 5, 2330-2334, (2005).
- [19] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, science, 321, 385-388, (2008).
- [20] V. V. Kleandrova, F. Luan, A. S. Planche, M. N. D. S. Cordeiro, Current Bioinformatics, 10, 565-578, (2015).
- [21] S. K. Sharma, L. Y. Chiang, M. R. Hamblin, Nanomedicine, 6, 1813-25, 2011.
- [22] M. Caricato, M. J. Frisch, eds., Gaussian 09: IOps Reference. Gaussian, (2009).

۵	-2345.033	1.35	-4821.639
---	-----------	------	-----------



شکل ۵ نمودار انرژی نسبی ترکیبات کمپلکس فولرن - سرتالین

۴. نتیجه گیری

مقاله پیشرو، واکنش‌دهندگی شیمیایی سرتالین و قرارگرفتن آن بر روی (C60) Bucky ball را با DFT B3LYP/6-311+G(d, p) در فاز گاز در نظر گرفته است. با توجه به ساختار شیمیایی، سرتالین فعالیت را به صورت پارامترهای الکترونیکی با توانایی گرفتن C60 که دارای پایداری است، از خود نشان داد. پنج سمت فعال برای سرتالین در نظر گرفته شده که تمامی آن‌ها پایداری ترمودینامیکی از خود نشان می‌دهند در حالی که ساختار ۳ دارای بالاترین پایداری است.

۵. منابع

- [1] K. Bezchlibnyk-Butler, I. Aleksic, S. H. Kennedy, Journal of Psychiatry and Neuroscience, 25, 241-254, (2000).
- [2] M. S. De Lima, Evidence-Based Mental Health, 4(3), 80, (2001).
- [3] S. H. Kang, G. Kim, Y. K. Kwon, Journal of Physics: Condensed Matter, 23, 505301, (2011).
- [4] S. Mallawaarachchi, M. Premaratne, P. K. Maini, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 25, 1-8, (2018).
- [5] L. Kalaugher, Physics World, 18, 9, (2005).
- [6] S. Wang, K. Poon, Z. Cai, Journal of hazardous materials, 342, 643-650, (2018).
- [7] M. Adolfsson-Erici, M. Pettersson, J. Parkkonen, J. Sturve, Chemosphere, 46, 1485-1489, (2002).
- [8] M. Zhao, Z. Huang, S. Wang, L. Zhang, C. Wang, Microporous and Mesoporous Materials, 294, 109905, (2020).
- [9] X. M. Lopez - Fernandez, H. R. Khataee, M. Y. Ibrahim, S. Sourchi, L. Eskandari, M. T. Noranis, COMPEL-The international journal for computation and mathematics in electrical and electronic engineering, 31, 2, 387-400, (2012).



Applied Study of Adsorption of Sertraline on Fullerene as anti-depression drug carriers

A. Safamanesh, S.A. Ahmadi*, E. Sheikhhosseini, D. Ghazanfari

Department of Chemistry, Kerman Branch, Islamic Azad University, Kerman, Iran

Abstract

Sertraline is an antidepressant drug used to treat depression, panic attacks, obsessive-compulsive disorder, post-traumatic stress disorder, social anxiety disorder, body dysmorphic disorder and severe PMS. In the present work, the properties related to the reactivity and chemical structure related to the medicinal properties of the antidepressant drug sertraline, in the process of adsorption of sertraline on fullerene (as an adsorbent) in the gas phase using DFT / B3LYP / 6-311 + G (d, p) has been obtained. The adsorption phenomenon on the fullerene molecule has been chemically studied and the adsorption energy has been calculated. Calculations of chemical structure including (dipolar moment), thermodynamic properties including (Gibbs free energy, enthalpy, Entropy as well as thermodynamic capacity) as well as electronic parameters such as (σ , μ , ω , χ and η) that are effective in justifying the chemical behavior of the compound have been calculated. Stability and reactivity calculations by HOMO and LUMO sertraline energies. Five chemically active regions for sertraline have been found, all of which have been shown to have thermodynamic stability, and this adsorption helps to transfer sertraline to biological systems.

Keywords: DFT, Sertraline, C60, Bucky ball, Reactivity.