بررسی خواص جذبی داروی تمودال بر روی فولرن عامل دار به عنوان یک حامل داروی ضد سرطان با استفاده از محاسبات شیمیایی کوانتومی

سید علی احمدی[۱و*] و مسلم ملک‌شاهی[۲]

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

۲- گروه فیزیک، واحد کرمان، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمان، ایران

چکیده

بررسی نظری قابلیت‌های جذب تمودال روی فولرن عامل دار شده با گروه هیدروکسی (C60-OH) برای سیستم‌های دارورسانی مناسب با استفاده از شبیه‌سازی‌های DFT انجام شد. هدف پژوهش، ارزیابی اثربخشی فولرن عامل دار شده در افزایش پایداری و کارایی آن در دارورسانی تمودال است. تمودال که به نام تموزولامایدنیز شناخته می شود دارویی است که برای درمان بسیاری از سرطان ها از جمله سرطان معده، روده و سینه استفاده می شود. فولرن دارای خواص قابل توجهی مانند پایداری بالا است که می تواند به عنوان یک حامل دارو در سیستم های دارورسانی هدفمند استفاده شود. این مطالعه بر روی ویژگی های ترکیب تمودال با فولرن عامل دار متمرکز شده است که می تواند تأثیر خوبی بر اثرات ضد سرطانی دارو داشته باشد .بر این اساس، واکنش جذب تمودال روی C60-OH با استفاده از DFT به روش B3LYP/6-311+G همراه با محاسبه انرژی جذب انجام شد. اطلاعات سطح انرژی HOMO (-9.816 eV) و LUMO (1.042 eV) هشت موقعیت فعال برای تمودال را نشان می دهد، که تأیید می‌کند که از نظر ترمودینامیکی پایدار است. در نهایت برهمکنش تمودال تا فولرن عامل دار شده مورد بررسی قرار گرفت و کاهش پتانسیل شیمیایی در ترکیب تمودال با فولرن C60-OH واکنش پذیری بهتر آن را نشان داد.

واژه‌های کلیدی: *تمودال ،C60 ، فولرن، فعالیت شیمیایی، DFT*

ایمیل نویسنده مسئول: saahmadi@iauk.ac.ir

۱-مقدمه

تمودال دارویی است که برای درمان بسیاری از سرطان ها از جمله سرطان معده، روده و سینه استفاده می شود [1]. به هر حال، عوارض جانبی رایج نیزبرای این دارو آشکار است. از عوارض جانبی این دارو می توان به کاهش اشتها، تب، سردرد، تنگی نفس و افزایش خطر ابتلا به سرطان های بعدی اشاره کرد[2]. مانند دیگرداروهای ضد سرطان، اعتقاد بر این است که تمودال با ایجاد اختلال در ساختار DNA کار می کند و به وضوح در فاز S چرخه سلولی عمل می کند [3].همچنین، اعتقاد بر این است که این دارو با مهار آنزیم ریبونوکلئوتید ردوکتاز عمل می کند [4].

در میان روش‌های مختلف دارورسانی هدفمند، می‌توان از نانوساختارها به طور مؤثر و کارآمد استفاده کرد و روند درمان بیماری‌ها تأثیر مؤثری دارد. نانو ذرات دارای اندازه ای با قطرهای بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر هستند که ممکن است داروها در آنها جذب، پراکنده یا محصور شوند [5]. در چند دهه اخیر، باکی بال ها به عنوان حامل های مبتنی بر کربن برای کاربردهای دارورسانی معرفی شده اند [6]. باکی‌بال‌ها که با نام فولرن‌ها نیز شناخته می‌شوند، آلوتروپ جدید کربن هستند [7]. فولرن ها ساختار خاصی دارند و به درمان برخی بیماری ها کمک می‌کنند. فولرن ها از ۱۲ پنج ضلعی و ۲۰ شش ضلعی با یک اتم کربن در هر لبه این ساختار شبکه تشکیل شده اند [8]. آنچه فولرن را برای رساندن دارو مفید می‌کند، توانایی رساندن آن به سلول‌های هدف است. باکی بال ها به عنوان حامل های داروهای ضد سرطان برای درمان استفاده می‌شوند[9,10] .

شیمی محاسباتی شاخه‌ای از شیمی نظری است که می‌تواند ساختار، انرژی و دیگر خصوصیات شناخته شده یا نشده مولکول‌ها را پیش گویی کند. برای انجام محاسبات باید از نرم افزارهای کامپیوتری استفاده نمود که سیستم‌های شیمیایی را شبیه‌سازی می‌نمایند. از طرف دیگر تمام روش‌های محاسباتی برای مطالعهٔ یک مولکول مناسب نیست. پس در ابتدا باید یک روش نظری مناسب را برای مطالعهٔ یک مولکول انتخاب نمود. در شیمی محاسباتی، سیستم‌هایی که به طور دقیق قابل حل

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۱۲/۰۳ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۱۲/۲۳ تاریخ پذیرش:۱۴۰۳/۰۲/۰۳

می‌باشند، عبارتند از سیستم‌های تک ذره‌ای یا دو ذره‌ای که سیستم دو ذره‌ای با استفاده از دستگاه مختصات مرکز جرم می‌توانند به دو مسئله تک ذره‌ای تبدیل شود. در مورد سیستم‌های چند ذره‌ای محاسبات ریاضی بسیار پیچیده و طولانی موردنیاز است.[11]

در مطالعه حاضر فولرن عاملدار شده با گروه هیدروکسی به عنوان جاذب تمودال در فاز گازی مبنی بر نظریه تابعیت چگالی با مجموعه پایه 6-311+G به کار گرفته شده است.

۲- روشهای محاسبات

محاسبات شیمیایی کوانتومی با استفاده از نرم افزار Gaussian 09W انجام شد. این فرآیند در نرم افزار Gaussian 09W با استفاده از DFT با روش B3LYP و بر اساس ٦-٣١١G+ همراه با محاسبه انرژی جذب و بدون حضور حلال و بدون اعمال دمای خاص انجام شد. پارامترهای الکتریکی و نیزخواص دینامیکی حرارتی با استفاده از پارامتر DFT با روش B3LYP بررسی شد[12, 13]. در این تحقیق از فولرن C60-OH به عنوان ماده جاذب استفاده شد که انرژی جذب آن به شرح زیر است(معادله ۱):

1) $E(ads) = E(Fullerene–Temodal) – (E(Temodal)+ E(Fullerene))$

معادلات (۲) تا (۵) خواص الکترونیکی را نشان می دهد.μ نشان‌دهنده پتانسیل شیمیایی،η نشان‌دهنده درجه سختی، s نشان‌دهنده درجه نرمی، وω نشان‌دهنده الکترون دوستی ترکیب است، که در آن IP و EA به ترتیب پتانسیل یونش و الکترون خواهی هستند.

2) $\mu = -(IP+EA)/2$

3) $\eta = (IP-EA)/2$

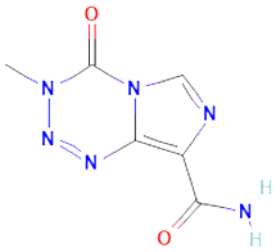
4) $S=1/\eta$

5) $\omega = \mu^2/2\eta$

۳- تجزیه و تحلیل نتایج

مهمترین نکته در مورد سیستم دارورسانی هدفمند این است که سیستم مورد مطالعه باید به گونه ای طراحی شود که در صورت اتصال، اجزای آن شکل گرفته و پایدار باشد، زیرا پایداری هر سیستمی به سطح انرژی آن بستگی دارد و هر چه سطح انرژی کمتر باشد، پایداری آن بیشتر است. پایداری این سیستم را می توان با مقدار سطح انرژی آن بررسی کرد. دومین عامل تاثیرگذار در طراحی یک سیستم دارورسانی هدفمند، بررسی حلالیت سیستم طراحی شده در آب است. این سیستم باید دارای قطبیت کافی برای حل شدن در حلال های قطبی باشد. برای دستیابی به این هدف، ابتدا یک گروه عاملی (OH) با فولرن پیوند داده شد که ساختار بهینه آن را می توان در شکل ۱ مشاهده کرد(دارای انرژی ۶۲۰۳,۴۱۲۵- کیلو ژول). با توجه به نتایج به دست آمده توسط مطالعه حاضر، تمام پارامترها با استفاده از DFT با روش B3LYP/6-311+G بررسی شدند[14, 15]. مشاهده می شود که هشت مکان فعال برای تمودال وجود دارد که دو اتم اکسیژن (O) و شش اتم نیتروژن (N) را شامل می شوند، که در شکل ۲ نشان داده شده است. اتم های نیتروژن و اکسیژن بدلیل داشتن الکترونگاتیوی بالا دارای جذب بالای الکترون از محیط پیرامون خود هستند. و به عنوان گروه های الکترون دهنده در محیط های واکنش شیمیایی شرکت می کنند و از انجا که اتم های کربن در ساختار فولرن دارای بار مثبت هستند و قطبیت کمی از این لحاظ دارا می باشد و به راحتی جذب این دو ساختار در محیط شیمیایی صورت می‌گیرد.

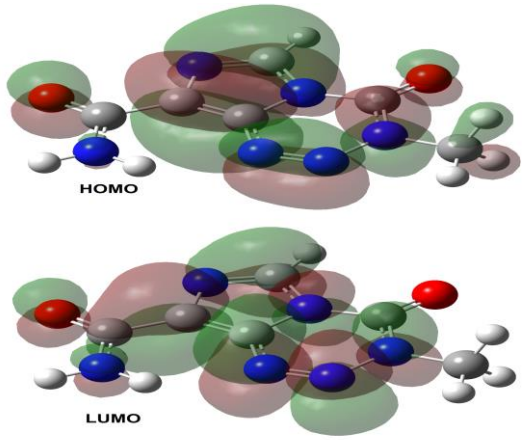
شکل۱. فولرن C60-OH بهینه شده با B3LYP/6-311+G
E = -6203.4125 kJ



شکل2. ساختار تمودال

می‌توان گفت که HOMO بالاترین اوربیتال مولکولی انرژی است که دارای الکترون است، در حالی که LUMO اوربیتال انرژی سطح بعدی است که الکترون ندارد. می توان گفت که هر چه شکاف انرژی اوربیتال های HOMO-LUMO یک ترکیب بیشتر باشد، تأثیر مستقیمی بر پایداری آن دارد و آن ترکیب پایدارتر است. انرژی HOMO نشان دهنده توانایی یک مولکول برای اهدای الکترون است. از عبارت قبلی، می توان استنباط کرد که با افزایش سطح انرژی HOMO، احتمال اهدای الکترون مولکول نیز افزایش می یابد. از سوی دیگر، با در نظر گرفتن انرژی LUMO، سطوح انرژی پایین تر احتمال بیشتری را برای مولکول برای پذیرش الکترون ها نشان می دهد. می توان نتیجه گرفت که پارامتر پتانسیل یونش (IP)

بالاتر منجر به افزایش پایداری می‌شود. شکاف انرژی HOMO-LUMO بیان می کند که مولکول های سخت دارای شکاف انرژی بزرگ و مولکول های نرم دارای شکاف انرژی کوچک هستند (شکل ۳). اجازه دهید ابتدا تعریف صحیح مولکول های سخت و مولکول های نرم را روشن کنیم. این اصطلاحات به قطبش پذیری الکترون ها در یک اتم یا یک مولکول اشاره دارد. پتانسیل یونیزاسیون (IP) توصیف کننده قابل توجهی از واکنش شیمیایی است، که در آن مقادیر IP بالاتر با افزایش پایداری همراه است. مولکول‌های سخت (η) شکاف‌های انرژی بزرگ‌تری را نشان می‌دهند، در حالی که مولکول‌های نرم (σ) واکنش‌پذیرتر هستند و به آسانی الکترون‌ها را برای پذیرش ارائه می‌کنند. شاخص الکتروفیلیسیتی(ω) برای توصیف توانایی یک مولکول برای پذیرش الکترون استفاده می شود. برای تمودال سطح انرژی HOMO آن به دلیل وجود اتم های الکترونگاتیو (اکسیژن، نیتروژن) در ساختار شیمیایی آن، درگیری قوی در واکنش های شیمیایی را نشان می‌دهد.

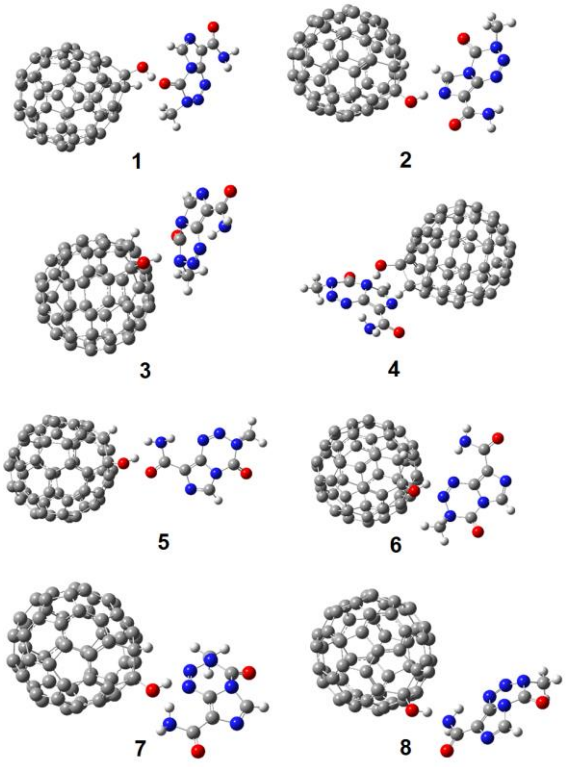


شکل3. HOMO و LUMO مولکول تمودال

جدول ۱، داده های مربوط به مقادیر اوربیتال های (HOMO و LUMO) ترکیب تمودال را نشان می دهد. بر اساس داده های این جدول، ممان دوقطبی تمودال ۶,۵۸ D است و پارامترهایی شامل آنتالپی (۱۸۴۵,۸۰- کیلوژول)، انرژی آزاد گیبس (۱۸۴۵,۹۳- کیلوژول)، ظرفیت گرمایی (۱۶۵,۰۶ J/mol-kelvin) و همچنین، آنتروپی (۴۳۰,۵۴ J/mol-kelvin) گزارش شده است.همچنین، بر اساس ساختار فولرن، شانس مشارکت برای تمام موقعیت های مختلف فولرن برای قرار گرفتن عامل هیدروکسی برابر است، پس فقط یک ساختار برای C60-OH وجود دارد. شکل ۴، تمام موقعیت های فعال تمودال را برای پذیرش فولرن C60-OH نشان می دهد.

جدول ۱: داده های انرژی و ممان دوقطبی تمودال

Parameters	Values
Energy	-1846.24 kJ
Gibbs free energy	-1845.93 kJ
Enthalpy	-1845.80 kJ
Entropy	430.54 J/mol-kelvin
Heat Capacity	165.06 J/mol-kelvin
Dipole moment	6.58 Debye
HOMO	-9.816 ev
LUMO	1.042 ev



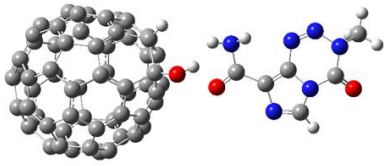
شکل۴. ساختار کمپلکس های تمودال-فولرن

در ساخت ترکیبات، اتم ها تمایل دارند در جهت کاهش انرژی حرکت کنند. شکل ۵، ساختارهای بهینه و پایدار کمپلکس فولرن-تمودال را نشان می دهد. محصول یک واکنش بهتر به تشکیل یک ماده پایدارتر کمک می کند [16-23]. به این ترتیب ما به دنبال بالاترین و پایین سطوح انرژی (HOMO- LUMO) هستیم. با توجه به نتایج به دست آمده برای تمودال، واکنش پذیری قابل توجهی در واکنش های شیمیایی برای این

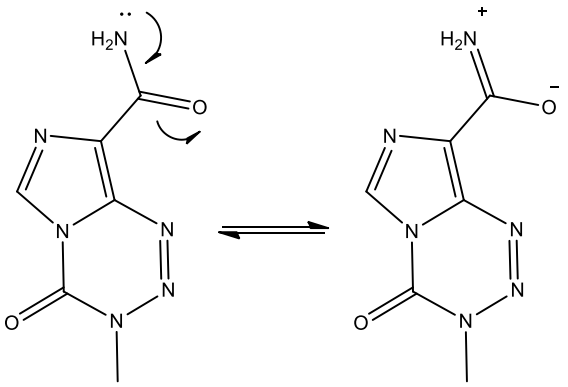
داروقابل مشاهده است. جدول ۲، پارامترهای واکنش پذیری تمودال را نشان می دهد. هشت موقعیت مختلف تمودال دارای زوایا و فضاهای شیمیایی متفاوتی هستند که می تواند بر جذب و انرژی ترکیب تاثیر بگذارد. داده های انرژی جذب و خواص الکترونیکی در جدول ۳ آورده شده است. نمودار ۱، تراز انرژی ساختارهای متفاوت کمپلکس را نشان میدهد. با توجه به داده های به دست آمده، مشخص شد که هر هشت موقعیت تمودال با فولرن عاملدار شده پایداری خوبی دارند و در بین آنها، ترکیب پنجم پایدارتر از سایرین است (شکل ۵). این پایداری را می توان به رزونانس در تمودال نسبت داد (شکل 6)، که باعث افزایش یک بار منفی برروی اکسیژن گروه کربونیل شده و پیوند هیدروژنی بین اکسیژن تیمودال و گروه هیدروکسی فولرن را افزایش می‌دهد. دلیل استفاده از عامل OH برای ساختار فولرن افزایش برهمکنش بین هیدروژن عامل هیدروکسی و بار منفی روی هترواتمهای تیمودال و در نتیجه جذب بهتر دارو بر روی فولرن است[24].

جدول ۲: پارامترهای الکترونیکی تمودال در فاز گاز

Parameters	Values
IP (ev)	9.816
EA (ev)	-1.042
X (ev)	4.387
μ (ev)	-4.387
η (ev)	5.428
σ (ev)	0.184
ω (ev)	1.773



شکل۵. ساختار بهینه کمپلکس تمودال-فولرن (کمپلکس شماره ۵)

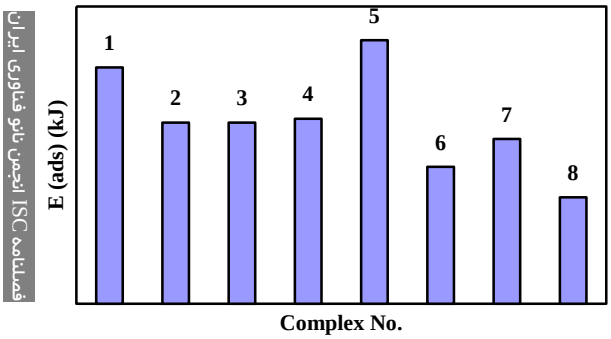


شکل۶. ساختارهای رزونانسی در تمودال

جدول ۳: داده های انرژی و الکترونیکی کمپلکس ها

Te-C60 complexes	E (ads) (kJ)	μ
۱	0.47416	-4.822
۲	0.47337	-4.787
۳	0.47249	-4.684
۴	0.47260	-4.701
۵	**0.47498**	**-4.903**
۶	0.47115	-4.574
۷	0.47199	-4.638
۸	0.47022	-4.516

نمودار ۱: تراز انرژی ساختارهای متفاوت کمپلکس



فصلنامه انجمن نانو فناوری ایران ISC

پتانسیل شیمیایی (μ) را می توان برای محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی برای مواد مختلف تحت شرایط فشار و دمای خاص استفاده کرد. علاوه بر این، در ارزیابی پایداری مواد، ترکیبات شیمیایی و محلول ها هنگام در نظر گرفتن فشار و دمای ثابت کمک می کند. تمودال پتانسیل شیمیایی -4.387 eV

را نشان می‌دهد که پایداری آن را در فاز گاز تأیید می‌کند. انرژی منفی انرژی ذخیره شده در پیوندهای شیمیایی تمودال را منعکس می کند. مقادیر داده های Δ و μ برای تمودال و کمپلکس نشان می دهد که در محصول حاصل از ترکیب آنها، دو پارامتر ذکر شده در مقایسه با تمودال کمتر است که منجر به واکنش پذیری بیشتر برای ترکیب می شود. (جدول ۴)

جدول ۴: داده های شیمیایی تیمودال، فولرن عامل دار شده و کمپلکس شماره ۵ بر حسب eV

Molecular parameters	Temodal	C60	Temodal-C60
E_{HOMO}	-9.816	-6.365	-5.942
E_{LUMO}	1.042	-3.714	-3.864
ΔE	10.858	2.651	2.078
IP	9.816	6.365	5.942
EA	-1.042	3.714	3.864
χ	4.387	5.039	4.903
μ	-4.387	-5.039	-4.903
σ	0.184	0.755	0.962
η	5.428	1.325	1.039
ω	1.773	9.582	11.569

۴. نتیجه گیری

این مطالعه با استفاده از DFT با روش B3LYP و مجموعه پایه 6-311+G ، جذب تمودال را روی جاذب فولرن C60-OH بررسی کرد .تجزیه و تحلیل داده های انرژی(- HOMO (9.816 eVو LUMO (1.042 eV) هشت ناحیه مجزا برای تمودال را نشان داد .تمام کمپلکس های تمودال با فولرن C60-OH پایداری قوی را نشان دادند که ترکیب پنجم پایدارترین آنها بود .این تحقیق که در فاز گاز انجام شد، از DFT (B3LYP/6-311+G)برای ارزیابی محاسبات انرژی فرآیند جذب بین تمودال و جاذب فولرن C60-OH استفاده کرد .در حالی که خواص شامل آنتالپی (۱۸۴۵,۸۰- کیلوژول)، انرژی آزاد گیبس (۱۸۴۵,۹۳- کیلوژول)، ظرفیت گرمایی (۱۶۵,۰۶ J/mol-kelvin) و همچنین، آنتروپی (۴۳۰,۵۴ J/mol-kelvin)گزارش گردیدهمچنین پارامترهای الکترونیکی مانند پتانسیل شیمیایی برای تمودال و کمپلکس پایدارتر محاسبه شد. کاهش پتانسیل شیمیایی در ترکیب تمودال با فولرن C60-OH دلیلی بر واکنش پذیری بهتر آن است. می توان انتظار داشت که استفاده از حامل ها برای انتقال داروی تمودال تاثیر خوبی بر روی خواص و پایداری دارو داشته باشد.

۵. منابع

[1] A.O. Sasmita, Y.P. Wong, A.P.K. Ling, *Asia. Pak. J. Clin. Oncol.*, 2018, 14, 40-51. DOI: 10.1111/ajco.12756

[2] A.F. Farago, B.Y. Yeap, M. Stanzione, Y.P. Hung, etc., *Cancer Discov.*, 2019, 9, 1372–1387. DOI: 10.1158/2159-8290.CD-19-0582

[3] A. Singh, Y.J. Xu, *Genes (Basel)*, 2016, *7*, 99. DOI: 10.3390/genes7110099

[4] M.M. Salmani ,M. Hashemian , H.J. Yekta , M. Ghadiri Nejad , S. Saber-Samandari, A. Khandan , *J. Supercond. Nov. Magn.*, 2020, *33*, 2809-2820. DOI: 10.1007/s10948-020-05530-1

[5] S. Sahmani, A. Khandan, S. Saber-Samandari, M.M. Aghdam, *Mater. Sci. Eng.*, 2020, *111*, 110835. DOI: 10.1016/j.msec.2020.110835

[6] A. Kordjamshidi, S. Saber-Samandari, M. Ghadiri Nejad , A. Khandan, *Ceram. Int.*, 2019, *45*, 14126-14135. DOI: 10.1016/j.ceramint.2019.04.113

[7] R. Bakry , R.M. Vallant , M. Najam-ul-Haq, M. Rainer, Z. Szabo ,C.W. Huck, G.K. Bonn, *Int. J. Nanomedicine.*, 2007, *2*, 639-649. PMID: 18203430; PMCID: PMC2676811

[8] K. Raza , N. Thotakura , P. Kumar , M. Joshi ,S. Bhushan , A. Bhatia . V. Kumar, R. Malik, G. Sharma, S.K. Guru, O.P. Katare, *Int. J. Pharm.*, 2015, *495*, 551-559. DOI: 10.1016/j.ijpharm.2015.09.016

[9] H. Xu, X. Tu, G. Fan, Q. Wang, X. Wang, X. Chu, *J. Mol. Liq.*, 2020, *318*, 114315.DOI:10.1016/j.molliq.2020.114315

[10] W. Li ,T. Zhao, *J. Mol. Liq.*, 2021, *340*,117226.DOI:10.1016/j.molliq.2021.117226

[11] G.J. Ogunwale, H. Louis, T.E. Gber, A.S. Adeyinka. *J. Environ. Chem. Eng.*, 2022, *10*, 108802. DOI: 10.1016/j.jece.2022.108802

[12] N.Tagmatarchis , H.Shinohara, *Mini. Rev. Med. Chem.*, 2001, *1*, 339-348. DOI: 10.2174/1389557013406684

[13] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, H. Nakatsuji, Gaussian DV, revision H. 10 (2010).

[14] L.Ye, L. Kollie, X.Liu, W.Guo, X.Ying, J. Zhu, S. Yang, M. Yu, *Mol.*, 2021, *26*, 3252. DOI: 10.3390/molecules26113252

[1156] F. Yahyazadeh, S.A. Ahmadi, D. Ghazanfari, M.R. Akhgar, *J. Org. Chem. Res.*, 2021, *7*, 200-205. DOI: 10.22036/org.chem.2023.340281.1276

[16] J.T. Muya, M.T. Nguyen , A. Ceulemans, *Chem. Phys. Lett.*, 2009, *483*, 101-106. DOI: 10.1016/j.cplett.2009.10.014

[17] Z. NazarAli , S.A. Ahmadi , D.Ghazanfari , E. Sheikhhosseini, *Nanochem. Res.*, 2022, *7*, 22-27. DOI: 10.22036/ncr.2022.01.004

[18] R. Razavi, H. Beitollahi, S.A. Ahmadi, M. Salajegheh, *J. Indian Chem. Soc.*, 2023, *100*, 101090.

DOI: 10.1016/j.ji. *Res.*, 2023, *8*, 40-49. DOI: 10.22036/ncr.2023.01.004

[20] Y. Najibzadeh Vameghabadi, E. Sheikhhosseini, M.R. Akhgar, S.A. Ahmadi, *Iran. J. Chem. Chem. Eng.*, 2022, *41*, 2628-2634. DOI: 10.30492/ijcce.2022.131624.4261

[21] S. Tavakoli, cs.2023.101090

[19] N. Jafari, S.A. Ahmadi, R. Razavi, *Nanochem* S.A. Ahmadi, D.Ghazanfari, E. Sheikhhosseini, *J. Indian Chem. Soc.*, 2022, *99*, 100561. DOI: 10.1016/j.jics.2022.100561

[22] Y. Najibzadeh Vameghabadi, E. Sheikhhosseini, M.R. Akhgar, S.A. Ahmadi, *Pak. J. Pharm. Sci.*, 2022, *35*, 815-818. DOI: 10.36721/PJPS.2022.35.3.REG.815-818.1

[23] S.J. Emamjome Koohbanani, S.A. Ahmadi, D.Ghazanfari, E. Sheikhhosseini, *Carbon. Trends.*, 2024, *14*, 100332. DOI: 10.1016/j.cartre.2024.100332

[24] S.J. Pooyaie, S.A. Ahmadi, *Org. Chem. Res.*, 2022, *8*, 29-32. DOI: 10.22036/org.chem.2023.422277.1297

Investigating the absorption properties of Temodal drug on functionalized fullerene as an anticancer drug carrier using quantum chemical calculations

S.A. Ahmadi[1,*] and M. Malekshahi[2]

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

2. Department of Physics, Kerman Branch, Islamic Azad University, Kerman, Iran

Abstract:

A theoretical investigation of the adsorption capabilities of Temodal on fullerene functionalized with hydroxy group (C60-OH) for suitable drug delivery systems was carried out using DFT simulations. The aim of the research is to evaluate the effectiveness of functionalized fullerene in increasing its stability and efficiency in modal drug delivery. Temodal, also known as temozolamide, is a drug used to treat many cancers, including stomach, colon, and breast cancer. Fullerene has remarkable properties such as high stability, which can be used as a drug carrier in targeted drug delivery systems. This study focused on the characteristics of the combination of Temodal with fullerene, which can have a good effect on the drug's anticancer effects. Based on this, the temodal adsorption reaction on C60-OH was carried out using DFT using the B3LYP/6-311+G method and calculating the adsorption energy. The HOMO (-9.816 eV) and LUMO (1.042 eV) energy level data show eight regions for the modal, confirming that it is thermodynamically stable. Finally, the interaction of Temodal with functionalized fullerene was investigated and the reduction of chemical potential in the combination of Temodal with C60-OH fullerene showed better reactivity

Keywords: DFT, Temodal, C60, Bucky ball, Reactivity**.**