مطالعه داروها به روش محاسبات کوانتومی

از آنجایی که داروها نقش بسیار مهمی در سلامت جامعه ایفا می کنند همیشه مورد توجه بسیاری از محققان و دانشمندان بوده‌اند و مطالعات زیادی به منظور بررسی عملکرد آنها انجام شده است. بدیهی است که در این مطالعات بسیاری از ویژگی های داروها از جمله خواص درمانی، نحوه‌ی سنتز، پایداری و طول عمر آنها بررسی شده است. یکی از مطالعات خاصی که تا امروز روی داروها انجام شده است ، مطالعه آنها از طریق روش‌های محاسباتی و به ویژه محاسبات کوانتومی است که روی طیف وسیعی از آنها انجام شده است.

در این بررسی به مطالعه داروها با روش‌های محاسبات کوانتومی مانند روش‌های DFT ، HF و روش های نیمه تجربی می‌پردازیم. از طریق محاسبات ساختارها و پارامترهای هندسی بهینه شده، طیف‌های مختلف ارتعاشی، رامان، FT-IR و UV-Vis بدست می آیند و با مقادیر تجربی مقایسه می شوند. همچنین آنالیزهای مختلف از جمله NBO، NLO وغیره انجام می‌شود. همچنین با استفاده از محاسبات بهترین مکانیسم فرآیند دارو تعیین می شود و به دنبال آن عملکرد دارو تحت تاثیر قرار می گیرد و از این جهت دارای اهمیت می باشد.

نتیجه محاسبات نشان می دهد که اکثر پارامترهای هندسی بهینه شده مانند طول و زاویه پیوند و همچنین طیف های مختلف ارتعاشی، رامان، FT-IR و UV-Vis داروها در تطابق بسیار خوبی با مقادیر تجربی شان هستند. با انجام محاسبات کوانتومی روی داروها مشاهده می‌کنیم که تشکیل کمپلکس میان داروهای ایزوله و ساختارهایی که خواص درمانی دارند، منجر به ایجاد حامل‌های دارورسان متنوع و موثرتری می شود. همچنین از طریق محاسبات فرکانس‌های هماهنگ میتوان حالت‌ها گذار هر مولکول دارویی را بدست آورد. نتایج محاسبات نشان می دهد که وجود یک میدان الکتریکی باعث تغییر خواص فیزیکی و شیمیایی سیستم های مولکولی می شود.