



مقایسه عملکرد انتقال و جداسازی آنتی بیوتیک سیپروفلوکساسین از منابع آبی با استفاده از حلال های اوتکتیک عمیق طبیعی مبتنی بر کولین کلرید و مالیک اسید/ساکسنیک اسید

شهربانو سرائی و فاطمه موسوی بایگی*

دانشگاه فردوسی مشهد، دانشکده علوم، گروه شیمی، moosavibaigi@um.ac.ir

چکیده

وجود منابع آب سالم و مسائل بهداشتی مرتبط با آن از موضوعات مهم در حیطه ی زیست محیطی به شمار می رود و امروزه به علت حضور ریزآلاینده های دارویی در اکوسیستم های آبی به یک چالش تبدیل شده است (۱). حضور ترکیبات دارویی، به طور ویژه آنتی بیوتیک ها، در منابع آبی سبب افزایش مقاومت در برابر انواع پاتوژن ها شده و تهدید جدی برای سلامت انسان محسوب می گردد. بنابراین، حذف کارآمد ریزآلاینده های ناشی از ترکیبات آنتی بیوتیکی از اکوسیستم های آبی مستلزم روشی مقرون به صرفه و به طور ویژه سازگار با محیط زیست است. در این پژوهش، با رویکرد نظری و استفاده از شبیه سازی MD، حذف و انتقال آنتی بیوتیک سیپروفلوکساسین (CFX) به کمک نسل جدیدی از حلال های سبز با منشأ طبیعی (NADES) (۲) مورد مطالعه قرار گرفته است. سامانه های حاوی مخلوط کولین کلرید/مالیک اسید (ChCl.Ma) و کولین کلرید/ساکسنیک اسید (ChCl.Sa) به عنوان NADES های هدف در کنار ترکیب دارویی و آب شبیه سازی شدند.

بررسی برهمکنش های جفتی نشان می دهد، ارتباطات جفتی آب با CFX در سامانه ی حاوی حلال ChCl.Ma با شدت بیشتر رخ می دهد و درگیری کمتر اجزای حلال ChCl.Ma با آب و آنتی بیوتیک را تأیید می کند. از سوی دیگر، به علت کاهش درگیری اجزای DES با CFX افزایش میزان ضریب نفوذ هر یک از اجزا در مقایسه با سیستم دیگر مشهود است. در دو سامانه ی حاوی DES - دارو - آب، برهمکنش میان جزء دهنده پیوند هیدروژنی (HBD) و آنتی بیوتیک نشان می دهد Sa با قدرت بیشتر اما تعداد قرارگیری کمتر با CFX نسبت به جزء HBD مالیک اسید ارتباط برقرار می کند. این امر نیز بر ضریب نفوذ CFX اثر گذاشته و مشاهده می شود این خصوصیت دینامیکی CFX در سیستم آب - دارو - ChCl.Ma بیشتر است. بنابراین، حلال سبز ChCl.Ma باعث بهبود وضعیت انتقال CFX از آب در حضور حلال اوتکتیک عمیق مذکور و در نتیجه افزایش ضریب نفوذ آن می گردد. تحرک کمتر Sa در مقایسه با کاتیون کولین نشان می دهد HBD توانایی محصور کردن CFX را دارد.

چگالی موضعی آنتی بیوتیک در سیستم حاوی حلال ChCl.Sa بیشتر از سیستم دیگر بوده و فواصل اتمی بین گونه های CFX نیز کمتر است. بنابراین، DES مبتنی بر ChCl.Ma در پخش و انتقال CFX از آب بهتر عمل می کند. آب در حلال ChCl.Ma چگالی کمتر با توزیع محدودتر را تجربه می کند. این موضوع بر بهبود انتقال و تحرک CFX در سامانه ی حاوی ChCl.Ma - دارو - آب تأکید داشته و در نهایت کاهش تجمعات ترکیب دارویی در آب را به دنبال دارد. ارزیابی میزان جذب CFX توسط هر یک از حلال های سبز در حضور آب نشان می دهد اجزای حلال ChCl.Sa با مقدار بیشتر انرژی جذب ($-4.647 \text{ kJ.mol}^{-1}$) توانایی جداسازی دارو را از آب دارند.

مراجع

- (1) C. Chen, Y. Cao, A. Ali, S. Toufouki, S. Yao; *Environ. Res.*, 231, 116180 (2023).
- (2) L. Gontrani, N. V. Plechkova, M. Bonomo; *ACS Sustain. Chem. Eng.*, 7, 12536-12543 (2019).