**فرم اطلاعات پایان نامه های کارشناسی ارشد ودکترای حرفه ای**

|  |  |
| --- | --- |
| **کد واحد : 117** **کد شناسائی پایان­نامه: 11730308941001** | **نام واحد دانشگاهی:دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت**  |
| **سال و نیمسال اخذ پایان نامه: نیمسال اول 1394-1395**  | **نام و نام خانوادگی دانشجو:** **فرزاد قلی نیا لوحه سرا****شماره دانشجوئی: 900737906**  |
| **عنوان پایان­نامه کارشناسی ارشد یا دکترای حرفه­ای:****مطالعه خواص جذب پیپوبرومن روی سطح نانولوله های کربنی و بورنیترید با استفاده از نظریه تابع چگالی** |
| **نمره پایان­نامه دانشجو به عدد: 18****به حروف: هجده** | **تاریخ دفاع از پایان­نامه: 31/06/1395****تعداد واحد پایان­نامه: 6** |
| چکیده پایان نامه:در سالهای اخیر، استفاده از نانو حامل های انتقال دارو مورد تحقیق و بررسی قرار گرفته است. در این تحقیق پنج نانولوله مختلف به عنوان حامل های مولکول دارویی پیپوبرومن مورد استفاده قرار گرفته است. ابتدا ساختار مولکول دارویی پیپوبرومن و نانولوله ها به وسیله نرم افزارهایNanotubeModeler و GaussView ترسیم شده و سپس به وسیله نرم افزارGaussian 09 با روش B3LYP 6-31G\*(d) DFT بهینه گردید. بعد از آن مولکول پیپوبرومن از دو سمت هترواتم های خود، یعنی اتم اکسیژن و برم بر سطح نانولوله های مختلف قرار گرفته و ساختار آنها نیز به روش ذکرشده بهینه گردید. نتایج حاصل، شامل اطلاعات مربوط به انرژی اتصال، ممان دو قطبی، خواص بنیادی (پتانسیل یونش، الکترون خواهی، پتانسل شیمیایی، سختی و نرمی) و شکاف انرژی HOMO-LUMO ، محاسبه و ارزیابی شدند. از نظر انرژی اتصال و میزان جذب ، نانولوله (C) CNT(5,5) and pipobroman(Br) بهترین بر همکنش را با مولکول دارویی پیپوبرومن از سمت اتم برم داشته است. همچنین از نظر ممان دو قطبی نانولوله (e) BNNTdoped Ga and pipobroman(Br) بیشترین ممان دو قطبی را با مولکول پیپوبرومن نشان داده است. ساختار این نانولوله با مولکول پیپوبرومن(به ویژه از سمت Br) قطبش پذیری و انتقال بار زیادی را نسبت به سایر ساختار ها نشان داده است.کلید واژه: نانولوله، پیپوبرومن، گوسین۰۹،داروی ضد سرطان |

**1- این فرم باید تایپ شده تحویل داده شود. نام ونام خانوادگی استاد راهنما: دکتر مجید کیاء امضاء**

**2- چکیده فوق همان چکیده داخل پایان نامه است. نام ونام خانوادگی استاد مشاور: امضاء**