

## چکیده

فناوری نانو رشته‌ای از دانش کاربردی است که حوزه‌های گسترده‌ای را پوشش می‌دهد. در واقع نانوفناوری فهم به کارگیری خواص جدیدی از مواد و سپس اتم‌هایی در ابعاد نانو است که اثرات فیزیکی جدیدی از خود نشان می‌دهند. استفاده از نانوفناوری در علم پزشکی اخیراً مورد توجه زیادی واقع شده است. توانایی یک نانولوله برای انتقال دارو به قطر آن و جهت گیری مولکول‌های وارد شونده بستگی دارد. در این تحقیق ابتدا نانولوله‌های کربنی، بور نیتريد و بور فسفر با کایرالیته (۵،۵) و (۸،۰) و (۷،۰) و مولکول هیدروکسی اوره با نرم افزار Nanotube modeler ترسیم و به روش DFT/B3TLYP، تابع پایه 6-31G(d) و با استفاده از نرم افزار گوسین ۰۹، بهینه شدند. با قرار دادن مولکول دارویی بر روی نانولوله‌ها، ساختارهای ایجاد شده بهینه گردیدند. سرانجام مطالعاتی بر روی ممان دو قطبی، شکاف بین HOMO و LUMO، پتانسیل یونش، سختی، نرمی، الکترون خواهی و پتانسیل شیمیایی مولکول دارویی قبل و بعد از قرار گرفتن بر روی نانولوله‌ها مورد مطالعه قرار گرفتند. تعدادی از ساختارهای بهینه شده با این روش رسانایی و جذب شیمیایی خوبی را نسبت به استفاده از حالت آزاد دارو از خود نشان دادند.

**واژگان کلیدی:** گوسین، نانولوله، هیدروکسی اوره، نظریه تابعی چگالی