

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 سیستم‌هایی در ابعاد نانو است که اثرات فیزیکی جدیدی از خود نشان می‌دهند. استفاده از نانوفناوری در علم پزشکی اخیراً مور 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 دارویی فنوکسودیول با نرم افزار Nanotube modeler ترسیم و به روش DFT/BTLYP، 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. سر انجام 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، فنوکسودیول، نظریه تابعی چگالی