مطالعه خواص جذب پیپوبرومن روی سطح نانولوله های کربنی و بورنیترید با استفاده از نظریه تابع چگالی

فرزاد قلی نیا لوحه سرا *,152,

1395-6-31

مطالعه خواص جذب پیپوبرومن روی سطح نانولوله های کربنی و بورنیترید با استفاده از نظریه تابع چگالی چکیده 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 DFT (d)6-31G B3LYP 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 ، جذب میزان و اتصال انرژی نظر از .شدند ارزیابی و محاسبه ، CNT(5,5) and (C) نانولوله pipobroman(Br) بهترین بر همکنش را با مولکول دارویی پیپوبرومن از سمت اتم برم داشته است. همچنین از نظر ممان دو قطبی نانولوله pipobroman and Ga BNNTdoped (e)(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.

کلمات کلیدی : نانولوله، پیپوبرومن، گوسین۰۹،داروی ضد سرطان

Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database
دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها