

مطالعه خواص جذب هیدروکسی اوره بر روی سطح نانو لوله‌های کربنی و بورنیتريد با استفاده از نظريه تابعی چگالی

زهرا يوسفی*، 152،

1396-11-10

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 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 کایرالیتنه (5,5) و (8,0) و (7,0) و مولکول هیدروکسی اوره با نرم افزار modeler Nanotube ترسیم و به روش دادن قرار با .شدند بهینه، 09 گوسین افزار نرم از استفاده با و 6-31G(d) پایه تابع، DFT/B3TLYP، مولکول دارویی بر روی نانولوله‌ها، ساختار-های 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 ساختار-های بهینه شده با این روش رسانایی و جذب شیمیایی خوبی را نسبت به استفاده از حالت آزاد دارو از خود نشان دادند.

کلمات کلیدی : گوسین، نانولوله، هیدروکسی اوره، نظريه تابعی چگالی

[Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database](#)

[دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها](#)