

# مطالعه خواص جذب سطحی داروی ضد سرطان هسپرتین بر روی سطح نانو لوله‌های کربنی و بورنیتريد با استفاده از نظريه تابعی چگالی

ستاره فروحي خطيبانی\*, 152,

1397-11-09

کاربرد فناوری نانو در شیمی، فیزیک، الکترونیک و رایانه، در حال تکامل و توسعه است. در این پژوهش بر روی کاربردهای پزشکی فناوری نانو، به دلیل توانایی‌های این علم جهت درمان بیماری‌های خاص و تولید داروهای جدید در سال‌های اخیر قوت یافته 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 با کایرالیتته (5,5) و (8,0) و مولکول هسپرتین با نرم افزار modeler Nanotube ترسیم و به روش B3LYP/DFT، تابع پایه 6-31G(d) و با استفاده از نرم افزار گوسین 09، 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.

کلمات کلیدی : گوسین، نانولوله، هسپرتین، نظریه تابعی چگالی

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

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