



دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر
فصلنامه‌ی کاربرد شیمی در محیط زیست

سال پنجم، شماره‌ی ۱۷
زمستان ۱۳۹۲، صفحات ۵۵-۴۱

مطالعه جذب داروی پیمگدین بر روی نانو تیوب بورنیتريد (۵/۰) از

طریق محاسبات DFT

ایمان رئیسی شهرضایی

دانشجوی ارشد شیمی فیزیک، دانشگاه آزاد شهرضا

www.shimagh1987@yahoo.com

چکیده

در این تحقیق دارو بر روی بسترهای مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. داروی مربوطه مدلی از یک داروی دیابت به نام پیمگدین بوده که نقش نانو لوله بورنیتريد در حمل این دارو بررسی شده است. برای این منظور لوله بورنیتريد زیگزاگ (۵/۰) با طول‌های مختلف و نانو کربن مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است و از نرم افزار گوسین و روش DFT/B3LYP و سری پایه‌های ۳-۲۱ G و ۶-۳۱ G برای انجام محاسبات استفاده شده است. برای مشاهده تاثیرات نانو ساختارها در ماهیت دارو مولکول پیمگدین را مستقیماً یک بار از سر و یک بار از بدنه به هر یک از نانو ساختارها متصل کرده‌ایم. محاسبات در دو فاز گازی و مایع انجام شده است که نتیجه حاصله نشان داده که اتصال دارو به سر نانو تیوب باعث حلالیت بهتر دارو خواهد بود. پارامترهایی نظیر انرژی و زوایا و طول پیوند و ممان دو قطبی برای یافتن بهترین ساختار محاسبه شده است. برای دارو سری پایه ۳-۲۱G ممان دو قطبی صفر و برای سری پایه ۶-۳۱G ممان دو قطبی ۴/۱۵ دبا‌ی به دست آمده پس ساختار دارو با وجود ۴ نیتروژن تاکیدی بر آن است که سری پایه ۶-۳۱G مناسب‌تر است. بررسی انرژی جذب نیز نشان می‌دهد که در مورد سری پایه ۶-۳۱G مقادیر انرژی منفی‌تر است و هم‌چنین بررسی طول پیوند نشان می‌دهد که برای اتصال به دارو تنها بستر نانو لوله (۰/۶) با طول ۸ آنگستروم در فاز مایع مناسب است. البته بستر نانو کربن به دلیل دارا بودن BN منفی‌تر مسلماً بستر مناسب‌تری است.

کلید واژه: نانو لوله بورنیتريد -DFT- ممان دو قطبی - انرژی جذب - تئوری کاربرد تراکم

مقدمه

قابلیت بسیار مهم این روش مطالعاتی، مطالعه ساختارها در ابعاد اتمی و حتی زیر اتمی است که نکته بسیار مهمی است که ابزارهای مطالعاتی موجود در تجربه، قادر به چنین مطالعه‌ای نیستند و این اهمیت در نانو ساختارها که با ابعاد کوچک تر هستند دو چندان است. نانو لوله‌های کربنی ساختارهایی هستند که به خاطر ساختار تو خالی و کوچک خود کوچک تر از سلول‌های قرمز خون، نقش ویژه‌ای در زمینه پزشکی، نظیر انتقال داروها به سلول‌های هدف، بیوسنسور گلوکز خون، شناسایی و از بین بردن سلول‌های سرطانی، مهندسی بافت و غیره دارند [۱]. یکی از امتیازات اصلی استفاده از نانو لوله‌ها انتقال دارو است. این انتقال هدف مند باعث می‌شود، دوز کمتری از دارو مورد استفاده قرار بگیرد. همان طور که می‌دانید اکثر داروهای ضد سرطان عوارض جانبی نیز دارند، اما شناسایی هدف از طریق انتقال دارو به کمک نانو کربن‌ها باعث کاهش این عوارض می‌شود [۲]. در تحقیقی دیگر پارامترهای H-NMR و C-NMR برای یکی از داروهای معروف ضد تشنج به نام توپیرامات^۱ با نانو لوله تک دیواره بررسی شده است محاسبات به روش تئوری تابع چگالی انجام شده و سری پایه ۳۱G-۶ به کار رفته است نتیجه این است که نانو لوله تک دیواره و توپیرامات ترکیب مناسبی برای حمل دارو در محیط‌های مختلف است. در کاری دیگر توسط محققین جذب داروی ضد سل ۲- متیل هپتیل ایزونیکوتینات روی نانو لوله کربن آرمیچر (۵/۵) بررسی شده نتایج نشان می‌دهد

که عامل دار کردن دیواره نانو لوله از نظر ترمودینامیکی مطلوب است و به شدت باعث پایداری سیستم می‌شود کاهش انرژی حلال پوشی در مقایسه با فاز گازی نشانی از پایداری سیستم و افزایش انحلال پذیری دارو در حضور پایه نانو لوله عامل دار شده است در نتیجه اصلاح شیمیایی دیواره نانو لوله با استفاده از طرح عامل دار کردن کوالانسی تدبیری موثر برای بارگذاری و تحویل مولکول‌های دارو هست [3].

نانو لوله بورنیتريد

بورنیتريد هگزگونال (h-BN) یک ماده لایه‌ای شبیه به گرافیت و دارای ساختار کریستالی هگزگونال است. به هر حال انتظار می‌رود ویژگی‌های بورنیتريد هگزگونال متفاوت از ساختارهای نانو مقیاس نیتريد بور باشد. ایده پیشش لایه‌های هگزگونال بورنیتريد برای تشکیل نانو لوله‌ها شبیه نانولوله‌های کربنی برای اولین بار در سال ۱۹۹۴ از سوی رویو و هم کارانش ارائه شد. حذف ناخالصی‌های بور نیتريد مانند نانو ذرات، نوارها و موادی بی‌شکل از نانو لوله‌ها با استفاده از برهم کنش قوی بین نانو لوله و یک پلی‌مر ترکیبی مورد توجه واقع شده است. پلی‌مر ترکیبی به‌طور انتخابی اطراف نانو لوله‌ها را می‌پوشاند. در کار دیگر، حذف ناخالصی‌های بور نیتريد استفاده شود. در این مورد، یک فرآیند سه مرحله‌ای استفاده شده است [۴].

نقص نانو لوله‌های بور نیتريد

انتهای نانو لوله‌های بور نیتريد با انتهای نانو لوله‌های کربن خالص متفاوت بوده و حضور پنج وجهی‌ها در انتهای نانو

1. topiramate

داخل سلول‌ها می‌باشد. این انتقال هدف‌مند باعث می‌شود، دوز کم‌تری از دارو مورد استفاده قرار بگیرد.

مواد و روش

ابتدا ساختار دارو، عامل و بسترهای مورد نیاز را به کمک نرم افزارهای نانو تیوب مدلر و گوس ویو رسم می‌کنیم سپس برای ساختن فایل هادی ورودی گوسین که هر یک از حالت هادی مورد نظر ما را بررسی شامل می‌شود به کمک نرم افزار گوسین ساخته و درون این نرم افزار با پسوند .gif که قابل اجرا در گوسین می‌باشد را بعد از دادن دستور مورد نظر آماده می‌کنیم. کلیه دستورات بر پایه روش DFT/B3LYP و سری پایه ۳-۲۱G استوار است و ما برای اینکه محاسبات را به صورت کیفی انجام دهیم برهم-کنش‌ها بین نانو تیوب و دارو را هم در فاز گاز و هم در فازمایع در نظر گرفته‌ایم. به صورت کلی در این پروژه ابتدا ما به دلیل این که ساختار دارو دارای ۴ نیتروژن مختلف است در بررسی اول تاثیر بین برهم‌کنش اتصال هر یک از نیتروژن‌ها به نانو تیوب را برای انتخاب بهترین نیتروژن برای اتصال به بستر و بعد انتخاب نیتروژن تاثیر میزان طول نانو تیوب و تاثیر نوع بستر را به صورت کامل گزارش می‌کنیم. علاوه بر این آن مقادیر HOMO و LUMO نیز برای ساختارهای مورد مطالعه محاسبه شد. در این تحقیق با توجه به نقش نانو لوله‌های بورنیتريد نسبت به نانو لوله‌های کربنی در بررسی جدی دارو بر روی بسترهای مناسب مدلی از یک داروی دیابت بیماری قند به نام پیمگدین برای مطالعه نقش نانو لوله بورنیتريد در حمل دارو مورد بررسی قرار گرفت.

لوله‌های بور نیتريد از نظر انرژی قابل توجه نیستند عموماً نانو لوله‌های بور نیتريد سر بسته دارای کلاهک هادی تیزی هستند و فرض بر این است که یا سه چهارگوش B_2N_2 ترکیبی از چهارگوش B_2N_2 و کی هشت وجهی (B_4N_4) یا سه جفت از واحدهای پنج تایی شامل تعداد زیادی از اتم هادی نیتروژن، می‌توانند باعث ایجاد این کلاهک باشند به هر حال، هنوز نوع نقص بور نیتريد در محدوده کلاهک‌ها ثابت نشده است و باید در این زمینه تحقیقات بیشتری انجام گیرد بلاس و هم‌کارانش از نظر تئوری محاسبه کردند که نقص‌های پنج وجهی-هفت وجهی در نانو لوله‌های بور نیتريد ناپایدارند، زیرا از نظر پیوندی خنثی هستند. این اثر، حضور دو اتم از یک نوع در کنار هم یک پیوند B-B یا N-N را با انرژی بالاتر ثابت می‌کند [۵].

محققان با استفاده از دینامیک مولکول ab initio دریافتند که لبه‌های آرمیچر تمایل به بستن پیوندهای آزاد و آویزان دارند که نقص‌های چهارگوش را ایجاد و باعث بسته شدن نانو لوله می‌شود در حالی که لبه‌های زیگزاگ دارای پیوندهای آزاد هستند که بسته می‌شوند ولی دوباره در ادامه شبیه‌سازی باز می‌شوند اخیراً تشکیل نقص‌ها در نانو لوله‌های بور نیتريد با تابش الکترونی به وسیله میکروسکوپ الکترونی از زبیل^۲ و هم‌کارانش گزارش شده است [۶].

یکی از امتیازات اصلی استفاده از نانو لوله‌ها در انتقال داروها به خاطر قابلیت انتقال آسان آن‌ها از میان غشاء سلولی و در پی آن امکان انتقال موثر و هدف‌مند عوامل درمانی، به

برای این منظور نانو لوله بورنیتريد زيگزاگ (۵,۰) با طول اتم هيدروژن بسته شده‌اند. متفاوت در نظر گرفته شده است. دهانه تمام نانو تيوب‌ها با

یافته‌ها

جدول ۱- انرژی الکترونی بسته هادی بکار رفته و دارو استفاده شده در حالت بهینه‌سازی در فازهای گاز و مایع (بر حسب هارتری)

بستر دارو	3-21G انرژی الکترونی		6-31G انرژی الکترونی	
	گاز	مایع	گاز	مایع
نانو تیوب (۶,۰) با طول ۶ انگسترم	-۷۹۸/۴۷	-۷۹۸/۴۹	-۸۰۲/۶۰	-۸۰۲/۶۲
نانو تیوب (۶,۰) با طول ۸ انگسترم	-۱۱۹۴/۸۵	-۱۱۹۴/۸۷	-۱۲۰۱-۰۱	-۱۲۰۱/۰۳
نانو تیوب (۶,۰) با طول ۱۰ انگسترم	-۱۵۹۱/۲۳	-۱۵۹۱/۲۵	-۱۵۹۹/۴۳	-۱۵۹۹/۴۵
نانوکن	-۱۵۶۱/۶۹	-۱۵۶۱/۷۳	-۱۵۶۱/۷۳	-۱۵۶۱/۹۰
دارو	-۲۵۲/۲۲	-۲۵۹/۲۴	-۲۶۰/۳۳	-۲۶۰/۴۳

جدول ۲- تغییر زاویه دارو بر حسب درجه بعد از بهینه‌سازی در کنار نانو تیوب در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز و مایع، اتصال از سر

نانو تیوب تابع پایه 3-21G

شماره زاویه دارو انتخابی	3-21G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۳۱/۹۷	۲۹/۱۵	۳۶/۶۴	۳۴/۶۴	۳۳/۸۴	۳۵/۹۱	۳۰/۹۷	۲۸/۳۲
۲	۲۸/۱۷	۲۸/۸۵	۳۴/۱۳	۳۲/۹۶	۳۴/۳۲	۳۵/۸۹	۳۱/۰۹	۳۱/۶۳
۳	۲۴/۰۳	۲۸/۹۱	۲۶/۹۰	۲۴/۲۶	۳۳/۶۵	۲۳/۷۹	۲۵/۵۲	۳۰/۵۱
۴	۳۸/۶۰	۳۳/۶۵	۲۹/۰۵	۳۲/۹۳	۲۵/۹۷	۳۳/۱۶	۳۳/۶۹	۲۷/۸۹

جدول ۳- تغییر زاویه دارو بر حسب درجه بعد از بهینه‌سازی در کنار نانو تیوب در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز و مایع، اتصال از سر

نانو تیوب تابع پایه 6-31G

شماره زاویه دارو انتخابی	6-31G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۲۹/۳۸	۲۹/۳۸	۳۵/۸۱	۳۲/۳۴	۳۲/۸۰	۳۳/۰۴	۲۹/۶۵	۲۹/۳۸
۲	۳۰/۷۶	۳۰/۷۶	۳۴/۳۸	۳۲/۲۴	۳۳/۶۷	۳۳/۶۴	۳۱/۰۳	۳۰/۷۶
۳	۲۸/۶۹	۲۶/۱۶	۲۶/۶۵	۲۵/۱۰	۲۵/۱۸	۲۵/۴۶	۸۹/۲۵	۱۶/۲۶
۴	۲۸/۳۲	۳۳/۲۸	۲۹/۰۶	۳۳/۳۲	۳۱/۳۴	۳۲/۹۳	۳۳/۳۴	۳۱/۹۳

جدول ۴- تغییر زاویه دارو بر حسب درجه بعد از بهینه‌سازی در کنار نانو تیوب در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز و مایع، اتصال از سر

نانو تیوب تابع پایه 3-21G

شماره زاویه دارو انتخابی	3-21G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۳۱/۹۵	۴۳/۳۱	۲۸/۵۵	۳۵/۵۰	۳۵/۵۵	۳۱/۵۷	۳۰/۴۳	۳۰/۴۲
۲	۲۹/۸۴	۳۷/۱۳	۲۸/۸۹	۳۳/۶۸	۲۶/۰۶	۲۶/۳۱	۳۳/۵۴	۳۴/۰۴
۳	۲۴/۸۹	۲۲/۹۳	۲۹/۰۰	۲۵/۴۶	۲۹/۶۳	۳۰/۰۵	۲۵/۴۰	۳۴/۹۷
۴	۳۵/۷۴	۳۱/۲۰	۳۱/۷۰	۳۴/۲۳	۳۴/۴۷	۳۴/۶۳	۳۴/۳۲	۳۴/۴۶

جدول ۵- تغییر زاویه دارو بر حسب درجه بعد از بهینه‌سازی در کنار نانو تیوب در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز و مایع، اتصال از سر

نانو تیوب تابع پایه 6-31G*

شماره زاویه دارو انتخابی	6-31G*							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۲۷/۹۲	۲۸/۵۱	۳۳/۴۶	۳۳/۲۵	۳۰/۵۵	۳۰/۵۳	۲۹/۰۹	۲۹/۱۳
۲	۲۹/۰۶	۳۱/۵۰	۳۲/۷۷	۳۲/۸۱	۲۶/۳۲	۲۶/۵۲	۳۳/۰۳	۳۳/۳۸
۳	۳۱/۹۹	۲۸/۲۱	۳۳/۶۸	۲۶/۱۲	۲۹/۴۲	۲۹/۹۶	۲۵/۷۹	۲۵/۵۴
۴	۲۸/۷۴	۲۹/۸۷	۲۴/۵۰	۳۵/۵۹	۳۴/۱۶	۳۴/۴۹	۳۴/۰۳	۳۰/۰۵

جدول ۶- تغییر طول پیوند دارو بعد از بهینه‌سازی در کنار نانو تیوب در حالت بررسی از نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز و مایع، اتصال از سر نانو تیوب و

تابع پایه 3-21G (بر حسب آنگسترم).

شماره طول انتخابی	3-21G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۱/۴۴	۱/۴۳	۱/۴۸	۱/۴۴	۱/۴۷	۱/۵۴	۱/۴۳	۱/۴۲
۲	۱/۳۶	۱/۳۷	۱/۳۵	۱/۴۷	۱/۴۴	۱/۴۵	۱/۳۶	۱/۳۶
۳	۱/۲۶	۱/۲۸	۱/۳۲	۱/۲۹	۱/۲۸	۱/۳۵	۱/۲۸	۱/۳۴
۴	۱/۵۵	۱/۴۳	۱/۳۵	۱/۳۶	۱/۳۶	۱/۲۸	۱/۴۳	۱/۳۳

جدول ۷- تغییر طول پیوند دارو بعد از بهینه‌سازی در کنار نانو تیوب در حالت بررسی از نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز و مایع، اتصال از سر نانو تیوب و

تابع پایه 6-31G (بر حسب آنگسترم).

شماره طول انتخابی	6-31G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۱/۴۰	۱/۴۰	۱/۴۴	۱/۴۱	۱/۴۴	۱/۴۴	۱/۴۰	۱/۴۰
۲	۱/۳۷	۱/۳۷	۱/۳۵	۱/۳۹	۱/۴۳	۱/۴۳	۱/۳۷	۱/۳۷
۳	۱/۲۹	۱/۲۹	۱/۳۲	۱/۳۰	۱/۲۹	۱/۳۹	۱/۲۹	۱/۲۹
۴	۱/۴۹	۱/۴۲	۱/۳۵	۱/۳۷	۱/۳۷	۱/۳۶	۱/۴۲	۱/۴۲

جدول ۸- تغییر طول پیوند دارو بعد از بهینه‌سازی در کنار نانو تیوب در حالت بررسی از نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز و مایع، اتصال از بدنه نانو تیوب و

تابع پایه 3-21G (بر حسب آنگسترم).

شماره طول انتخابی	3-21G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۱/۴۴	۱/۳۳	۱/۴۵	۱/۴۷	۱/۳۵	۱/۳۵	۱/۳۵	۱/۳۴
۲	۱/۳۷	۱/۴۷	۱/۳۵	۱/۴۲	۱/۳۷	۱/۳۸	۱/۴۱	۱/۴۲
۳	۱/۲۷	۱/۲۹	۱/۳۱	۱/۲۹	۱/۳۳	۱/۳۳	۱/۳۷	۱/۲۸
۴	۱/۴۹	۱/۳۳	۱/۳۶	۱/۳۶	۱/۳۶	۱/۳۵	۱/۲۸	۱/۳۶

جدول ۹- تغییر طول پیوند دارو بعد از بهینه سازی در کنار نانو تیوب در حالت بررسی از نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز و مایع، اتصال از بدنه نانو تیوب و تابع پایه 6-31G (بر حسب آنگسترم).

شماره طول انتخابی	6-31G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۱/۴۱	۱/۴۰	۱/۴۳	۱/۴۴	۱/۳۳	۱/۳۳	۱/۳۳	۱/۳۳
۲	۱/۳۶	۱/۳۶	۱/۴۰	۱/۴۰	۱/۳۷	۱/۳۸	۱/۴۰	۱/۴۱
۳	۱/۳۶	۱/۳۶	۱/۳۷	۱/۳۰	۱/۳۳	۱/۳۳	۱/۲۹	۱/۳۶
۴	۱/۳۲	۱/۳۴	۱/۲۹	۱/۳۶	۱/۳۶	۱/۳۵	۱/۳۷	۱/۲۹

جدول ۱۰- تغییر زاویه نانو تیوب بر حسب درجه کنار دارو بعد از بهینه سازی در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز، اتصال سر نانو تیوب برای توابع پایه 3-21G و 6-31G

شماره طول انتخابی	گاز							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G
۱	۲۸/۷۴	۳۵/۰۴	۳۸/۶۹	۳۸/۳۸	۳۴/۸۱	۳۴/۹۰	۳۴/۱۴	۳۴/۰۸
۲	۳۲/۳۵	۳۲/۳۷	۳۵/۷۴	۳۲/۱۳	۳۱/۹۳	۳۳/۲۵	۳۲/۲۱	۳۲/۳۲
۳	۳۰/۲۷	۳۱/۰۲	۳۰/۵۹	۳۰/۴۸	۳۰/۵۸	۳۰/۶۰	۳۰/۴۸	۳۰/۵۳
۴	۳۵/۳۹	۳۷/۱۸	۳۷/۰۱	۳۶/۸۸	۳۶/۵۳	۳۶/۷۲	۳۶/۴۸	۳۶/۳۹
۵	۲۹/۶۲	۳۱/۱۲	۲۹/۶۹	۳۰/۳۵	۲۹/۸۶	۳۰/۳۲	۳۰/۴۰	۳۰/۳۹
۶	۳۲/۰۶	۳۲/۲۸	۳۲/۰۷	۳۱/۹۸	۳۲/۲۳	۳۲/۴۱	۳۲/۳۲	۳۲/۵۱

جدول ۱۱- تغییر زاویه نانوتیوب بر حسب درجه کنار دارو بعد از بهینه‌سازی در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز، اتصال بدنه نانوتیوب

برای توابع پایه 3-21G و 6-31G

شماره طول انتخابی	گاز							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G
۱	۳۲/۱۲	۳۳/۷۵	۳۷/۷۶	۳۵/۷۵	۳۴/۶۲	۳۴/۴۵	۳۲/۵۹	۳۲/۵۱
۲	۲۹/۸۵	۳۰/۷۳	۳۱/۵۱	۳۴/۴۸	۳۵/۷۰	۳۵/۲۱	۳۱/۱۹	۳۴/۴۸
۳	۳۱/۶۶	۳۱/۳۵	۲۹/۱۴	۳۰/۸۹	۳۲/۲۵	۳۱/۹۵	۲۹/۶۶	۲۹/۵۰
۴	۳۰/۷۶	۳۱/۱۹	۳۷/۶۴	۳۷/۵۳	۳۱/۸۱	۳۱/۱۲	۳۱/۲۴	۳۰/۷۸
۵	۳۴/۱۶	۲۹/۷۸	۳۱/۰۳	۳۲/۴۸	۳۱/۰۶	۳۱/۴۷	۳۱/۸۸	۳۱/۹۲
۶	۳۱/۵۱	۳۰/۷۹	۳۰/۹۷	۳۰/۸۹	۲۸/۷۳	۲۸/۷۵	۳۰/۳۱	۲۸/۹۵

جدول ۱۲- تغییر زاویه نانوتیوب بر حسب درجه کنار دارو بعد از بهینه‌سازی در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز مایع، اتصال سر نانوتیوب برای

توابع پایه 3-21G و 6-31G

شماره طول انتخابی	گاز							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G
۱	۳۴/۲۸	۳۴/۱۷	۳۴/۰۶	۳۳/۹۲	۳۵/۵۸	۳۴/۸۲	۳۵/۷۰	۳۴/۱۷
۲	۳۳/۳۶	۳۳/۴۷	۳۳/۵۶	۳۳/۷۱	۳۳/۰۹	۳۳/۵۴	۳۳/۴۸	۳۲/۳۶
۳	۳۰/۴۴	۳۰/۴۹	۳۰/۳۵	۳۰/۴۱	۲۹/۷۰	۳۰/۵۳	۳۰/۲۴	۳۰/۴۹
۴	۳۶/۶۲	۳۶/۴۶	۳۶/۵۷	۳۶/۳۹	۳۶/۷۴	۳۶/۶۲	۳۶/۸۸	۳۶/۴۷
۵	۳۰/۳۹	۳۰/۳۹	۲۹/۶۹	۳۰/۴۳	۲۹/۷۵	۲۹/۹۳	۳۰/۴۸	۲۹/۹۳
۶	۳۲/۳۱	۳۲/۵۰	۳۱/۹۹	۳۲/۳۱	۳۵/۲۸	۳۲/۵۱	۳۱/۰۵	۳۲/۵۰

جدول ۱۳- تغییر زاویه نانوتیوب بر حسب درجه کنار دارو بعد از بهینه‌سازی در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز مایع، اتصال بدنه نانوتیوب

برای توابع پایه 3-21G و 6-31G

شماره طول انتخابی	گاز							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G
۱	۳۳/۵۵	۳۷/۷۰	۳۳/۹۷	۳۳/۸۰	۳۴/۵۲	۳۴/۸۳	۳۴/۱۶	۳۲/۸۷
۲	۲۹/۸۴	۳۴/۱۸	۳۰/۴۴	۳۰/۵۳	۲۸/۹۰	۳۴/۶۷	۳۰/۴۴	۳۴/۲۸
۳	۳۰/۰۹	۳۱/۰۸	۳۱/۶۴	۳۱/۳۱	۳۰/۸۰	۳۱/۵۹	۳۱/۲۰	۲۹/۳۶
۴	۳۱/۲۷	۳۷/۷۵	۳۱/۰۵	۳۱/۲۶	۳۱/۴۱	۳۱/۳۷	۳۱/۳۴	۳۱/۰۳
۵	۳۰/۹۲	۳۲/۰۵	۲۹/۷۰	۳۰/۰۴	۳۰/۱۷	۳۱/۲۶	۲۹/۸۴	۳۱/۷۴
۶	۳۰/۵۸	۳۰/۹۹	۳۱/۱۲	۳۱/۲۸	۲۸/۴۸	۲۸/۷۱	۳۰/۸۱	۲۸/۸۲

جدول ۱۴- ممان دو قطبی نانوتیوب با طول هادی مختلف بر حسب دبای در توابع پایه 3-21G و 6-31G

نانوتیوب با طول عمر مختلف	3-21G	6-31G
۶ آنگسترم	۶/۵۹	۶/۱۰
۸ آنگسترم	۶/۶۰	۶/۱۰
۱۰ آنگسترم	۶/۲۳	۵/۷۰

جدول ۱۵- ممان دو قطبی نانوتیوب در کنار دارو بر حسب دبای در توابع پایه 3-21G و 6-31G

نانوتیوب با طول عمر مختلف	3-21G	6-31G
(۵ و ۰) با طول ۶ آنگسترم	۴/۶۸	۴/۵۰
(۵ و ۰) با طول ۸ آنگسترم	۷/۹۳	۷/۴۳
(۵ و ۰) با طول ۱۰ آنگسترم	۴/۳۶	۴/۱۰

جدول ۱۶- تغییر طول پیوند نانو تیوب در کنار دارو بعد از بهینه سازی در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز، اتصال سر نانو تیوب برای توابع پایه 3-21G و 6-31G (بر حسب آنگسترم)

شماره طول انتخابی	گاز							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G
۱	۱/۴۸	۱/۵۳	۱/۵۸	۱/۵۷	۱/۴۹	۱/۴۸	۱/۴۹	۱/۵۰
۲	۱/۴۶	۱/۴۳	۱/۴۴	۱/۴۳	۱/۴۹	۱/۴۴	۱/۴۵	۱/۴۵
۳	۱/۴۸	۱/۴۹	۱/۴۹	۱/۴۸	۱/۴۹	۱/۴۸	۱/۴۷	۱/۴۸
۴	۱/۴۹	۱/۵۰	۱/۴۹	۱/۴۸	۱/۴۸	۱/۴۷	۱/۴۷	۱/۴۸
۵	۱/۴۶	۱/۴۳	۱/۴۴	۱/۴۴	۱/۴۶	۱/۴۵	۱/۴۵	۱/۴۶
۶	۱/۴۶	۱/۷۰	۱/۵۹	۱/۵۸	۱/۵۲	۱/۵۱	۱/۵۰	۱/۵۱

جدول ۱۷- تغییر طول پیوند نانو تیوب در کنار دارو بعد از بهینه سازی در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز، اتصال بدنه نانو تیوب برای توابع پایه 3-21G و 6-31G (بر حسب آنگسترم)

شماره طول انتخابی	گاز							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G
۱	۱/۵۶	۱/۵۳	۱/۶۶۰	۱/۵۱	۱/۵۳	۱/۶۰	۱/۵۹	۱/۵۸
۲	۱/۴۴	۱/۴۵	۱/۴۴	۱/۴۵	۱/۴۶	۱/۴۶	۱/۴۶	۱/۴۵
۳	۱/۵۶	۱/۴۷	۱/۵۰	۱/۳۷	۱/۴۷	۱/۴۵	۱/۴۶	۱/۴۵
۴	۱/۵۱	۱/۴۶	۱/۵۰	۱/۴۵	۱/۴۷	۱/۴۷	۱/۴۸	۱/۴۷
۵	۱/۴۴	۱/۴۴	۱/۴۴	۱/۴۵	۱/۴۳	۱/۴۵	۱/۴۶	۱/۴۵
۶	۱/۵۶	۱/۵۶	۱/۵۸	۱/۵۷	۱/۵۵	۱/۵۳	۱/۵۳	۱/۵۲

جدول ۱۸- تغییر طول پیوند نانو تیوب در کنار دارو بعد از بهینه سازی در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز مایع ، اتصال سر نانو تیوب برای توابع پایه 3-21G و 6-31G (بر حسب آنگسترم)

شماره طول انتخابی	گاز							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G
۱	۱/۵۰	۱/۴۹	۱/۵۱	۱/۵۰	۱/۵۳	۱/۴۹	۱/۵۵	۱/۴۹
۲	۱/۴۶	۱/۴۵	۱/۴۵	۱/۴۴	۱/۴۵	۱/۴۴	۱/۴۵	۱/۴۵
۳	۱/۴۸	۱/۴۷	۱/۴۸	۱/۴۷	۱/۴۹	۱/۴۷	۱/۴۸	۱/۴۷
۴	۱/۴۸	۱/۴۷	۱/۴۸	۱/۴۷	۱/۴۹	۱/۴۷	۱/۴۸	۱/۴۷
۵	۱/۴۶	۱/۴۵	۱/۴۵	۱/۴۴	۱/۴۵	۱/۴۵	۱/۴۶	۱/۴۵
۶	۱/۵۱	۱/۵۰	۱/۵۱	۱/۵۰	۱/۵۳	۱/۵۱	۱/۵۳	۱/۵۰

جدول ۱۹- تغییر طول پیوند نانو تیوب در کنار دارو بعد از بهینه سازی در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز مایع ، اتصال سر نانو تیوب برای توابع پایه 3-21G و 6-31G (بر حسب آنگسترم)

شماره طول انتخابی	گاز							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G	3-21G	6-31G
۱	۱/۵۵	۱/۵۳	۱/۵۳	۱/۵۲	۱/۶۱	۱/۵۹	۱/۵۹	۱/۵۸
۲	۱/۴۷	۱/۴۶	۱/۴۶	۱/۴۵	۱/۴۵	۱/۴۴	۱/۴۵	۱/۴۴
۳	۱/۴۸	۱/۴۶	۱/۴۸	۱/۴۷	۱/۴۷	۱/۴۶	۱/۴۷	۱/۴۶
۴	۱/۴۷	۱/۴۶	۱/۵۰	۱/۴۶	۱/۴۸	۱/۴۷	۱/۴۸	۱/۴۷
۵	۱/۴۴	۱/۴۴	۱/۴۴	۱/۴۴	۱/۴۶	۱/۴۵	۱/۴۶	۱/۴۵
۶	۱/۶۰	۱/۵۷	۱/۵۸	۱/۵۶	۱/۵۵	۱/۵۴	۱/۵۴	۱/۵۳

جدول ۲۰- انرژی الکترونی کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف اتصال از سر در فاز گاز در توابع پایه‌ی 6-31G و

3-21G (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-۱۴۵۳/۴۶	-۱۴۶۰/۹۷
N_2	-۱۴۵۲/۹۹	-۱۴۶۰/۴۹
N_3	-۱۴۵۲/۹۶	-۱۴۶۰/۴۷
N_4	-۱۴۶۰/۴۷	-۱۴۶۰/۴۷

جدول ۲۱- انرژی الکترونی کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف اتصال از بدنه در فاز گاز در توابع پایه‌ی 6-31G و-3

21G (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-۱۴۵۴/۱۳	-۱۴۶۱/۶۵
N_2	-۱۴۵۴/۱۵	-۱۴۶۱/۶۶
N_3	-۱۴۵۳/۵۲	-۱۴۶۱/۰۳
N_4	-۱۴۵۳/۵۲	-۱۴۶۱/۰۲

جدول ۲۲- انرژی الکترونی کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف اتصال از سر در فاز مایع در توابع پایه‌ی 6-31G و-3

21G (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-۱۴۵۲/۹۹	-۱۴۶۰/۵۰
N_2	-۱۴۵۲/۹۹	-۱۴۶۰/۵۱
N_3	-۱۴۵۲/۹۸	-۱۴۶۰/۵۱
N_4	-۱۴۵۲/۳۲	-۱۴۶۰/۵۰

جدول ۲۳- انرژی الکترونی کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف اتصال از سر در فاز مایع در توابع پایه‌ی 6-31G و 3-21G (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-۱۴۵۳/۵۲	-۱۴۶۱/۰۲
N_2	-۱۴۵۴/۱۸	-۱۴۶۱/۶۹
N_3	-۱۴۵۳/۵۵	-۱۴۶۱/۰۶
N_4	-۱۴۵۳/۵۵	-۱۴۶۱/۰۶

جدول ۲۴- انرژی جذب کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف اتصال از سر در فاز گاز در توابع پایه‌ی 6-31G و 3-21G (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-۶۵۴/۹۹	-۶۵۸/۳۷
N_2	-۶۵۴/۵۲	-۶۵۷/۹۸
N_3	-۶۵۴/۴۹	-۶۵۷/۸۷
N_4	-۶۷۱/۰۰	-۶۵۷/۸۷

جدول ۲۵- انرژی جذب کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف در توابع پایه‌ی 6-31G و 3-21G اتصال بدنه نانو تیوب در فاز گاز (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-۶۵۵/۶۶	-۶۵۹/۰۵
N_2	-۶۵۵/۶۸	-۶۵۹/۰۶
N_3	-۶۵۵/۰۵	-۶۵۸/۴۳
N_4	-۶۵۵/۰۵	-۶۵۸/۴۲

جدول ۲۶- انرژی جذب کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف در توابع پایه‌ی 3-21G و 6-31G اتصال از سر در فاز مایع (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-۶۵۴/۵۰	-۶۵۷/۸۸
N_2	-۶۵۴/۵۰	-۶۵۷/۸۹
N_3	-۶۵۴/۵۱	-۶۵۷/۸۹
N_4	-۶۵۳/۸۵	-۶۵۷/۸۸

جدول ۲۷- انرژی جذب کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف در توابع پایه‌ی 3-21G و 6-31G اتصال از بدنه در فاز مایع (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-۶۵۵/۰۳	-۶۵۸/۴۰
N_2	-۶۵۵/۶۹	-۶۵۹/۰۷
N_3	-۶۵۵/۰۶	-۶۵۸/۴۴
N_4	-۶۵۵/۰۶	-۶۵۷/۸۸

جدول ۲۸- ممان دو قطبی نیتروژن هادی اتصالی بر حسب دمای در فاز گاز با توابع پایه 3-21G و 6-31G

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	۴/۳۵	۷/۶۱
N_2	۷/۹۳	۷/۶۵
N_3	۶/۸۳	۶/۵۹
N_4	۶/۵۶	۶/۵۴

جدول ۲۹- انرژی الکترونی کمپلکس دارو نانوتیوب در اثر بسترهای مختلف فاز گاز و مایع (بر حسب هارتری)

نانوتیوب با طول مشخص	گاز	مایع
نانوتیوب و دارو با طول ۶ آنگستروم	-۶۵۴/۹۹	-۶۵۸/۳۷
دارو و نانوکن	-۲۵۸/۱۳	-۲۵۸/۱۳

جدول ۳۰- انرژی جذب کمپلکس دارو نانوتیوب در اثر بسترهای مختلف فاز گاز و مایع (بر حسب هارتری)

نوع بستر	3-21G
نانوکن	۱۰/۱۸
نانوتیوب	۶/۶۰

جدول ۳۱- ممان دو قطبی و نانوکن بر حسب دمای در تابع پایه 3-21G

مایع	گاز	نانو لوله با طول مشخص
-۱۶۶۰/۹۷	-۱۴۵۳/۴۶	نانوتیوب و دارو با طول ۶ آنگستروم
-۱۸۱۹/۸۶	-۱۸۱۹/۸۲	دارو و نانوکن

بحث و نتیجه گیری

با توجه به نتایج به دست آمده می توان از بستر بر پایه نانو لوله بورنیتريد (۵،۰) و نانوکن بورنیتريد به عنوان حامل داروی پیمگدین جهت رساندن دارو در بدن که این نتایج می تواند کاربرد بالقوه ای در داروسازی داشته باشد.

منابع

- [1] M.Ghiasi, A.Arefi, H.saeidian, Dynamic stereochemistry of Topiramate (anticonvulsant) drug in solution: theoretical approaches and experimental validation, J.Els res (2011)156-160.
- [2] M.Abdelbary, A.Elhissi, A. Waqar, H.Israr, carbon nanotube in Cancer Therapy and Drug Delivery, J.Drug Delivery. Rev (2011) 39-44.
- [3] H.Gao, X.Wei, X.Liu, C.Huang, DFT calculation of molecular structures and vibrational spectra of antitumor drug: Cis [pt (CH₃CN)₂ Cl₂], J Mand B (2010)461-465.
- [4] O.Lehtinen, T.Nikitin, V.Arkady, L.Sun, Ion irradiation of multi-walled boron nitride nanotubes, J.Phys (2010) 1256-1259.
- [5] S.Den, R.Thapa, K.Bhattacharjee, Site dependent metal adsorption on 93*3 h-BN monolayer: Stability, magnetic and optical properties, Tcim (2012)165-171.
- [6] W.Moon, H.Hwang, Molecular-dynamics simulation of defect formation energy in boron nitride nanotube, J.Phys.Lett (2004)446-451.