Archive of SID

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 بورنیترید (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 بورنیترید در حمل این دارو بررسی شده است برای این منظور لوله بور نیترید 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 G ۲۱-۳ و G ۳۱-۶ برای انجام محاسبات استفاده شده است. برای مشاهده تاثیرات نانو ساختارها در ماهیت دارو مولکول پیمگدین را مستقیما 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 ۲۱G-۳ ممان دو قطبی صفر و برای سری پایه ۳۱G-۶ ممان دو قطبی ۴/۱۵ دبای به دست آمده پس ساختار دارو با وجود ۴ نیتروژن تاکیدی بر آن است که سری پایه ۳۱G-۶ مناسب‌تراست. بررسی انرژی جذب نیز نشان می‌دهد که در مورد سری پایه ۳۱G-۶ 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 بور نیترید-DFT- ممان دوقطبی- انرژی جذب -تئوری کاربرد تراکم

www.SID.ir

Archive of SID

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 کوچک‌تر هستند دو چندان است. نانو لوله‌های کربنی ساختارهایی هستند که به خاطر ساختار تو خالی و کوچک خود کوچک‌تر 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 هدف‌مند باعث می‌شود، دوز کم‌تری از دارو مورد استفاده قرار بگیرد. همان‌طور 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[1] با نانو لوله تک دیواره بررسی شده است محاسبات به روش تئوری تابع چگالی انجام شده و سری پایه ۶-۳۱G به‌کار 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) بررسی‌شده نتایج نشان می‌دهد که عامل‌دار 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 انحلال‌پذیری دارو در حضور پایه نانو لوله عامل‌دار شده است در نتیجه اصلاح شیمیایی دیواره نانو لوله با استفاده از طرح عامل‌دار کردن کوالانسی تدبیری موثر برای بارگذاری و تحویل مولکول‌های دارو هست [3].

نانو لوله بورنیترید

بورنیترید هگزگونال (h-BN) یک ماده لایه‌ای شبیه به گرافیت و دارای ساختار کریستالی هگزاگونال است .به هر حال انتظار می‌رود ویژگی‌های بورنیترید هگزاگونال متفاوت از ساختارهای نانو مقیاس نیترید بور باشد. ایده پیچش لایه‌های هگزاگونال بورنیترید برای تشکیل نانو لوله‌ها شبیه نانولوله‌های کربنی برای اولین بار در سال ۱۹۹۴ از سوی روبیو و هم‌کارانش ارائه شد.حذف ناخالصی‌های بور نیترید مانند نانو ذرات ، نوارها و موادی بی‌شکل از نانو لوله‌ها با استفاده از برهم‌کنش 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 نیترید استفاده شود. در این مورد، یک فرآیند سه مرحله‌ای استفاده‌شده است [۴].

نقص نانو لوله‌های بور نیترید

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

1.topiramate

www.SID.ir

Archive of SID

لوله‌های بور نیترید از نظر انرژی قابل‌توجه نیستند عموماً نانو لوله‌های بور نیترید 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 نیترید 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 نیترید 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 نیترید 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 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 می کنیم. 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 این‌که ساختار دارو دارای۴ 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 بورنیترید نسبت به نانو لوله‌های کربنی در بررسی جذی دارو بر روی بسترهای مناسب مدلی از یک داروی دیابت بیماری قند به نام پیمگدین برای مطالعه نقش نانو لوله بورنیترید در حمل دارو مورد بررسی قرار گرفت.

2.Zebile

www.SID.ir

Archive of SID

برای این منظور نانو لوله بورنیترید زیگزاگ (۵,۰) با طول اتم هیدروژن بسته شده‌اند. متفاوت در نظر گرفته شده است. دهانه تمام نانو تیوب‌ها با

یافته‌ها

جدول۱- انرژی الکترونی بسته هادی بکار رفته و دارو استفاده‌شده در حالت بهینه‌سازی در فازهای گاز و مایع (بر حسب هارتری)

6-31G انرژی الکترونی		3-21G انرژی الکترونی		بستر دارو
مایع	گاز	مایع	گاز	
-۸۰۲/۶۲	-۸۰۲/۶۰	-۷۹۸/۴۹	-۷۹۸/۴۷	نانو تیوب (٦,0) با طول ٦ انگستروم
-۱۲۰۱/۰۳	-۱۲۰۱-۰۱	-۱۱۹٤/۸۷	-۱۱۹٤/۸۵	نانو تیوب (٦,0) با طول ۸ انگستروم
-۱۵۹۹/٤۵	-۱۵۹۹/٤۳	-۱۵۹۱/۲۵	-۱۵۹۱/۲۳	نانو تیوب (٦,0) با طول ۱۰ انگستروم
-۱۵٦۱/۹۰	-۱۵٦۱/۷۳	-۱۵٦۱/۷۳	-۱۵٦۱/٦۹	نانوکن
-۲٦۰/٤۳	-۲٦۰/۳۳	-۲۵۹/۲٤	-۲۵۲/۲۲	دارو

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	۳٦/٦٤	۳٤/٦٤	۳۳/۸٤	۳۵/۹۱	۳۰/۹۷	۲۸/۳۲
۲	۲۸۱۷	۲۸/۸۵	۳٤/۱۳	۳۲/۹٦	۳٤/۳۲	۳۵/۸۹	۳۱/۰۹	۳۱/٦۳
۳	۲٤/۰۳	۲۸/۹۱	۲٦/۹۰	۲٤/۲٦	۳۳/٦۵	۲۳/۷۹	۲۵/۵۲	۳۰/۵۱
٤	۳۸/٦۰	۳۳/٦۵	۲۹/۰۵	۳۲/۹۳	۲۵/۹۷	۳۳/۱٦	۳۳/٦۹	۲۷/۸۹

www.SID.ir

Archive of SID

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	۳۲/۳٤	۳۲/۸۰	۳۳/۰٤	۲۹/٦٥	۲۹/۳۸
۲	۳۰/۷٦	۳۰/۷٦	۳٤/۳۸	۳۲/۲٤	۳۳/٦۷	۳۳/٦٤	۳۱/۰۳	۳۰/۷٦
۳	۲۸/٦۹	۲٦/۱٦	۲٦/٦٥	۲٥/۱۰	۲٥/۱۸	۲٥/٤٦	۸۹/۲٥	۱٦/۲٦
٤	۲۸/۳۲	۳۳/۲۸	۲۹/۰٦	۳۳/۳۲	۳۱/۳٤	۳۲/۹۳	۳۳/۳٤	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	۳۱/۹٥	٤۳/۳۱	۲۸/٥٥	۳٥/٥۰	۳٥/٥٥	۳۱/٥۷	۳۰/٤۳	۳۰/٤۲
۲	۲۹/۸٤	۳۷/۱۳	۲۸/۸۹	۳۳/٦۸	۲٦/۰٦	۲٦/۳۱	۳۳/٥٤	۳٤/۰٤
۳	۲٤/۸۹	۲۲/۹۳	۲۹/۰۰	۲٥/٤٦	۲۹/٦۳	۳۰/۰٥	۲٥/٤۰	۳٤/۹۷
٤	۳٥/۷٤	۳۱/۲۰	۳۱/۷۰	۳٤/۲۳	۳٤/٤۷	۳٤/٦۳	۳٤/۳۲	۳٤/٤٦

جدول۵- 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 $6\text{-}31G^*$

شماره زاویه دارو انتخابی	$6\text{-}31G^*$							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۲۷/۹۲	۲۸/٥۱	۳۳/٤٦	۳۳/۲٥	۳۰/٥٥	۳۰/٥۳	۲۹/۰۹	۲۹/۱۳
۲	۲۹/۰٦	۳۱/٥۰	۳۲/۷۷	۳۲/۸۱	۲٦/۳۲	۲٦/٥۲	۳۳/۰۳	۳۳/۳۸
۳	۳۱/۹۹	۲۸/۲۱	۳۳/٦۸	۲٦/۱۲	۲۹/٤۲	۲۹/۹٦	۲٥/۷۹	۲٥/٥٤
٤	۲۸/۷٤	۲۹/۸۷	۲٤/٥۰	۳٥/٥۹	۳٤/۱٦	۳٤/٤۹	۳٤/۰۳	۳۰/۰٥

www.SID.ir

Archive of SID

جدول۶- 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 آنگستروم)

شماره طول انتخابی	3-21G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۱/٤٤	۱/٤۳	۱/٤۸	۱/٤٤	۱/٤۷	۱/٥٤	۱/٤۳	۱/٤۲
۲	۱/۳٦	۱/۳۷	۱/۳٥	۱/٤۷	۱/٤٤	۱/٤٥	۱/۳٦	۱/۳٦
۳	۱/۲٦	۱/۲۸	۱/۳۲	۱/۲۹	۱/۲۸	۱/۳٥	۱/۲۸	۱/۳٤
٤	۱/٥٥	۱/٤۳	۱/۳٥	۱/۳٦	۱/۳٦	۱/۲۸	۱/٤۳	۱/۳۳

جدول۷- 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 آنگستروم).

شماره طول انتخابی	6-31G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۱/٤۰	۱/٤۰	۱/٤٤	۱/٤۱	۱/٤٤	۱/٤٤	۱/٤۰	۱/٤۰
۲	۱/۳۷	۱/۳۷	۱/۳٥	۱/۳۹	۱/٤۳	۱/٤۳	۱/۳۷	۱/۳۷
۳	۱/۲۹	۱/۲۹	۱/۳۲	۱/۳۰	۱/۲۹	۱/۳۹	۱/۲۹	۱/۲۹
٤	۱/٤۹	۱/٤۲	۱/۳٥	۱/۳۷	۱/۳۷	۱/۳٦	۱/٤۲	۱/٤۲

جدول۸- 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 آنگستروم).

شماره طول انتخابی	3-21G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۱/٤٤	۱/۳۳	۱/٤٥	۱/٤۷	۱/۳٥	۱/۳٥	۱/۳٥	۱/۳٤
۲	۱/۳۷	۱/٤۷	۱/۳٥	۱/٤۲	۱/۳۷	۱/۳۸	۱/٤۱	۱/٤۲
۳	۱/۲۷	۱/۲۹	۱/۳۱	۱/۲۹	۱/۳۳	۱/۳۳	۱/۳۷	۱/۲۸
٤	۱/٤۹	۱/۳۳	۱/۳٦	۱/۳٦	۱/۳٦	۱/۳٥	۱/۲۸	۱/۳٦

www.SID.ir

Archive of SID

جدول۹- 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 6-31G (بر حسب آنگستروم).

شماره طول انتخابی	6-31G							
	N_1		N_2		N_3		N_4	
	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع	گاز	مایع
۱	۱/٤۱	۱/٤۰	۱/٤۳	۱/٤٤	۱/۳۳	۱/۳۳	۱/۳۳	۱/۳۳
۲	۱/۳٦	۱/۳٦	۱/٤۰	۱/٤۰	۱/۳۷	۱/۳۸	۱/٤۰	۱/٤۱
۳	۱/۳٦	۱/۳٦	۱/۳۷	۱/۳۰	۱/۳۳	۱/۳۳	۱/۲۹	۱/۳٦
٤	۱/۳۲	۱/۳٤	۱/۲۹	۱/۳٦	۱/۳٦	۱/۳۵	۱/۳۷	۱/۲۹

جدول۱۰- تغییر زاویه نانوتیوب بر حسب درجه کنار دارو بعد از بهینه‌سازی در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز، 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	۲۸/۷٤	۳۵/۰٤	۳۸/٦۹	۳۸/۳۸	۳٤/۸۱	۳٤/۹۰	۳٤/۱٤	۳٤/۰۸
۲	۳۲/۳۵	۳۲/۳۷	۳۵/۷٤	۳۲/۱۳	۳۱/۹۳	۳۳/۲۵	۳۲/۲۱	۳۲/۳۲
۳	۳۰/۲۷	۳۱/۰۲	۳۰/۵۹	۳۰/٤۸	۳۰/۵۸	۳۰/٦۰	۳۰/٤۸	۳۰/۵۳
٤	۳۵/۳۹	۳۷/۱۸	۳۷/۰۱	۳٦/۸۸	۳٦/۵۳	۳٦/۷۲	۳٦/٤۸	۳٦/۳۹
۵	۲۹/٦۲	۳۱/۱۲	۲۹/٦۹	۳۰/۳۵	۲۹/۸٦	۳۰/۳۲	۳۰/٤۰	۳۰/۳۹
٦	۳۲/۰٦	۳۲/۲۸	۳۲/۰۷	۳۱/۹۸	۳۲/۲۳	۳۲/٤۱	۳۲/۳۲	۳۲/۵۱

www.SID.ir

Archive of SID

جدول۱۱- 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	۳٤/٦۲	۳٤/٤٥	۳۲/۵۹	۳۲/۵۱
۲	۲۹/۸۵	۳۰/۷۳	۳۱/۵۱	۳٤/٤۸	۳۵/۷۰	۳۵/۲۱	۳۱/۱۹	۳٤/٤۸
۳	۳۱/٦٦	۳۱/۳۵	۲۹/۱٤	۳۰/۸۹	۳۲/۲۵	۳۱/۹۵	۲۹/٦٦	۲۹/۵۰
٤	۳۰/۷٦	۳۱/۱۹	۳۷/٦٤	۳۷/۵۳	۳۱/۸۱	۳۱/۱۲	۳۱/۲٤	۳۰/۷۸
۵	۳٤/۱٦	۲۹/۷۸	۳۱/۰۳	۳۲/٤۸	۳۱/۰٦	۳۱/٤۷	۳۱/۸۸	۳۱/۹۲
٦	۳۱/۵۱	۳۰/۷۹	۳۰/۹۷	۳۰/۸۹	۲۸/۷۳	۲۸/۷۵	۳۰/۳۱	۲۸/۹۵

جدول۱۲- 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	۳٤/۲۸	۳٤/۱۷	۳٤/۰٦	۳۳/۹۲	۳۵/۵۸	۳٤/۸۲	۳۵/۷۰	۳٤/۱۷
۲	۳۳/۳٦	۳۳/٤۷	۳۳/۵٦	۳۳/۷۱	۳۳/۰۹	۳۳/۵٤	۳۳/٤۸	۳۲/۳٦
۳	۳۰/٤٤	۳۰/٤۹	۳۰/۳۵	۳۰/٤۱	۲۹/۷۰	۳۰/۵۳	۳۰/۲٤	۳۰/٤۹
٤	۳٦/٦۲	۳٦/٤٦	۳٦/۵۷	۳٦/۳۹	۳٦/۷٤	۳٦/٦۲	۳٦/۸۸	۳٦/٤۷
۵	۳۰/۳۹	۳۰/۳۹	۲۹/٦۹	۳۰/٤۳	۲۹/۷۵	۲۹/۹۳	۳۰/٤۸	۲۹/۹۳
٦	۳۲/۳۱	۳۲/۵۰	۳۱/۹۹	۳۲/۳۱	۳۵/۲۸	۳۲/۵۱	۳۱/۰۵	۳۲/۵۰

www.SID.ir

Archive of SID

جدول۱۳- 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	۳٤/۵۲	۳٤/۸۳	۳٤/۱٦	۳۲/۸۷
۲	۲۹/۸٤	۳٤/۱۸	۳۰/٤٤	۳۰/۵۳	۲۸/۹۰	۳٤/٦۷	۳۰/٤٤	۳٤/۲۸
۳	۳۰/۰۹	۳۱/۰۸	۳۱/٦٤	۳۱/۳۱	۳۰/۸۰	۳۱/۵۹	۳۱/۲۰	۲۹/۳٦
٤	۳۱/۲۷	۳۷/۷۵	۳۱/۰۵	۳۱/۲٦	۳۱/٤۱	۳۱/۳۷	۳۱/۳٤	۳۱/۰۳
۵	۳۰/۹۲	۳۲/۰۵	۲۹/۷۰	۳۰/۰٤	۳۰/۱۷	۳۱/۲٦	۲۹/۸٤	۳۱/۷٤
٦	۳۰/۵۸	۳۰/۹۹	۳۱/۱۲	۳۱/۲۸	۲۸/٤۸	۲۸/۷۱	۳۰/۸۱	۲۸/۸۲

جدول۱۴- ممان دو قطبی نانوتیوب با طول هادی مختلف بر حسب دبای در توابع پایه‌ی 3-21G و 6-31G

نانوتیوب با طول عمر مختلف	3-21G	6-31G
٦ آنگسترم	٦/۵۹	٦/۱۰
۸ آنگسترم	٦/٦۰	٦/۱۰
۱۰ آنگسترم	٦/۲۳	۵/۷۰

جدول۱۵- ممان دو قطبی نانوتیوب در کنار دارو بر حسب دبای در توابع پایه‌ی 3-21G و 6-31G

نانوتیوب با طول عمر مختلف	3-21G	6-31G
(۰ و۵) با طول ٦ آنگسترم	٤/٦۸	٤/۵۰
(۰و۵) با طول ۸ آنگسترم	۷/۹۳	۷/٤۳
(۰ و ۵) با طول ۱۰ آنگسترم	٤/۳٦	٤/۱۰

www.SID.ir

Archive of SID

جدول۱۶- تغییر طول پیوند نانوتیوب در کنار دارو بعد از بهینه‌سازی در حالت بررسی اثر نیتروژن هادی مختلف در فاز گاز ، اتصال سر نانوتیوب برای توابع پایه 3-21G و 6-31G (بر حسب آنگستروم)

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	۱/٤٨	۱/٥٣	۱/٥٨	۱/٥٧	۱/٤٩	۱/٤٨	۱/٤٩	۱/٥٠
۲	۱/٤٦	۱/٤٣	۱/٤٤	۱/٤٣	۱/٤٩	۱/٤٤	۱/٤٥	۱/٤٥
۳	۱/٤٨	۱/٤٩	۱/٤٩	۱/٤٨	۱/٤٩	۱/٤٨	۱/٤٧	۱/٤٨
٤	۱/٤٩	۱/٥٠	۱/٤٩	۱/٤٨	۱/٤٨	۱/٤٧	۱/٤٧	۱/٤٨
٥	۱/٤٦	۱/٤٣	۱/٤٤	۱/٤٤	۱/٤٦	۱/٤٥	۱/٤٥	۱/٤٦
٦	۱/٤٦	۱/٧٠	۱/٥٩	۱/٥٨	۱/٥٢	۱/٥١	۱/٥٠	۱/٥١

جدول۱۷- تغییر طول پیوند نانوتیوب در 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 (بر حسب آنگستروم)

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	۱/٥٦	۱/٥٣	۱/٦٦٠	۱/٥١	۱/٥٣	۱/٦٠	۱/٥٩	۱/٥٨
۲	۱/٤٤	۱/٤٥	۱/٤٤	۱/٤٥	۱/٤٦	۱/٤٦	۱/٤٦	۱/٤٥
۳	۱/٥٦	۱/٤٧	۱/٥٠	۱/۳۷	۱/٤٧	۱/٤٥	۱/٤٦	۱/٤٥
٤	۱/٥١	۱/٤٦	۱/٥٠	۱/٤٥	۱/٤٧	۱/٤٧	۱/٤٨	۱/٤٧
٥	۱/٤٤	۱/٤٤	۱/٤٤	۱/٤٥	۱/٤٣	۱/٤٥	۱/٤٦	۱/٤٥
٦	۱/٥٦	۱/٥٦	۱/٥٨	۱/٥٧	۱/٥٥	۱/٥٣	۱/٥٣	۱/٥٢

www.SID.ir

Archive of SID

جدول۱۸- تغییر طول پیوند نانوتیوب در 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 (بر حسب آنگستروم)

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
٤	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
٦	۱/۵۱	۱/۵۰	۱/۵۱	۱/۵۰	۱/۵۳	۱/۵۱	۱/۵۳	۱/۵۰

جدول۱۹- تغییر طول پیوند نانوتیوب در 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 (بر حسب آنگستروم)

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	۱/٦۱	۱/۵۹	۱/۵۹	۱/۵۸
۲	۱/۴۷	۱/۴٦	۱/۴٦	۱/۴۵	۱/۴۵	۱/۴٤	۱/۴۵	۱/۴٤
۳	۱/۴۸	۱/۴٦	۱/۴۸	۱/۴۷	۱/۴۷	۱/۴٦	۱/۴۷	۱/۴٦
٤	۱/۴۷	۱/۴٦	۱/۵۰	۱/۴٦	۱/۴۸	۱/۴۷	۱/۴۸	۱/۴۷
۵	۱/۴٤	۱/۴٤	۱/۴٤	۱/۴٤	۱/۴٦	۱/۴۵	۱/۴٦	۱/۴۵
٦	۱/٦۰	۱/۵۷	۱/۵۸	۱/۵٦	۱/۵۵	۱/۵٤	۱/۵٤	۱/۵۳

www.SID.ir

Archive of SID

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	-۱٤٥۳/٤٦	-۱٤٦۰/۹۷
N_2	-۱٤٥۲/۹۹	-۱٤٦۰/٤۹
N_3	-۱٤٥۲/۹٦	-۱٤٦۰/٤۷
N_4	-۱٤٦۰/٤۷	-۱٤٦۰/٤۷

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	-۱٤٥٤/۱۳	-۱٤٦۱/٦٥
N_2	-۱٤٥٤/۱٥	-۱٤٦۱/٦٦
N_3	-۱٤٥۳/٥۲	-۱٤٦۱/۰۳
N_4	-۱٤٥۳/٥۲	-۱٤٦۱/۰۲

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	-۱٤٥۲/۹۹	-۱٤٦۰/٥۰
N_2	-۱٤٥۲/۹۹	-۱٤٦۰/٥۱
N_3	-۱٤٥۲/۹۸	-۱٤٦۰/٥۱
N_4	-۱٤٥۲/۳۲	-۱٤٦۰/٥۰

www.SID.ir

Archive of SID

جدول۲۳- 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	-۱٤٥۳/٥۲	-۱٤٦۱/۰۲
N_2	-۱٤٥٤/۱۸	-۱٤٦۱/٦۹
N_3	-۱٤٥۳/٥٥	-۱٤٦۱/۰٦
N_4	-۱٤٥۳/٥٥	-۱٤٦۱/۰٦

جدول۲۴- انرژی جذب کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف اتصال از سر در فاز گاز در توابع پایه‌ی 6-31G و3-21G (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-٦٥٤/۹۹	-٦٥۸/۳۷
N_2	-٦٥٤/٥۲	-٦٥۷/۹۸
N_3	-٦٥٤/٤۹	-٦٥۷/۸۷
N_4	-٦۷۱/۰۰	-٦٥۷/۸۷

جدول۲۵- انرژی جذب کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف در توابع پایه‌ی 6-31G و3-21G اتصال بدنه نانو تیوب در فاز گاز (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-٦٥٥/٦٦	-٦٥۹/۰٥
N_2	-٦٥٥/٦۸	-٦٥۹/۰٦
N_3	-٦٥٥/۰٥	-٦٥۸/٤۳
N_4	-٦٥٥/۰٥	-٦٥۸/٤۲

www.SID.ir

Archive of SID

جدول۲۶- انرژی جذب کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف در توابع پایه‌ی 6-31G و3-21G اتصال از سر در فاز مایع (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-٦٥٤/٥٠	-٦٥٧/٨٨
N_2	-٦٥٤/٥٠	-٦٥٧/٨٩
N_3	-٦٥٤/٥١	-٦٥٧/٨٩
N_4	-٦٥٣/٨٥	-٦٥٧/٨٨

جدول۲۷- انرژی جذب کمپلکس دارو نانو تیوب بعد از بهینه‌سازی برای اثر نیتروژن‌های مختلف در توابع پایه‌ی 6-31G و3-21G اتصال از بدنه در فاز مایع (بر حسب هارتری)

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	-٦٥٥/٠٣	-٦٥٨/٤٠
N_2	-٦٥٥/٦٩	-٦٥٩/٠٧
N_3	-٦٥٥/٠٦	-٦٥٨/٤٤
N_4	-٦٥٥/٠٦	-٦٥٧/٨٨

جدول۲۸- ممان دو قطبی نیتروژن هادی اتصالی بر حسب دبای در فاز گاز با توابع پایه 6-31Gو3-21G

نیتروژن انتخابی	گاز	
	3-21G	6-31G
N_1	٤/٣٥	٧/٦١
N_2	٧/٩٣	٧/٦٥
N_3	٦/٨٣	٦/٥٩
N_4	٦/٥٦	٦/٥٤

جدول۲۹- 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 ٦ آنگستروم	-٦٥٤/٩٩	-٦٥٨/٣٧
دارو و نانوکن	-٢٥٨/١٣	-٢٥٨/١٣

www.SID.ir

Archive of SID

جدول۳۰- انرژی جذب کمپلکس دارو نانوتیوب در اثر بسترهای مختلف فاز گاز و مایع (بر حسب هارتری)

نوع بستر	3-21G
نانوکن	۱۰/۱۸
نانوتیوب	٦/٦۰

جدول۳۱- ممان دو قطبی و نانوکن بر حسب دبای در تابع پایه 3-21G

نانو لوله با طول مشخص	گاز	مایع
نانوتیوب و دارو با طول ٦ آنگستروم	-١٤٥٣/٤٦	-١٤٦٠/٩٧
دارو و نانوکن	-١٨١٩/٨٢	-١٨١٩/٨٦

بحث و نتیجه‌گیری

با توجه به نتایج به دست آمده می‌توان از بستر بر پایه نانو لوله بورنیترید (۰و۵) و نانوکن بورنیترید به عنوان حامل داروی پیمگدین جهت رساندن دارو در بدن که این نتایج می‌تواند کاربرد بالقوه‌ای در داروسازی داشته باشد.

منابع

[1]M.Ghiasi, A.Arefi,H.saeidian, Dynamic stereochemistry of Topiramate (anticonva;sant)\ 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 Carcer 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 ribrational 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 an 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.

www.SID.ir