

عنوان مقاله:

بررسی پارامترهای توپولوژی نانولوله های کربنی تک جداره عامل دار شده با آزومتین و کاتکول به عنوان سیستم تحویل دارو

محل انتشار:

ششمین کنفرانس بین المللی شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

سیده فاطمه سادات مظلوم حسینی - گروه شیمی، دانشکده فیزیک و شیمی، دانشگاه الزهراء، تهران، ایران

منصوره زاهدی تبریزی - گروه شیمی، دانشکده فیزیک و شیمی، دانشگاه الزهراء، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

در این پژوهش ساخت سیستم های دارورسانی مبتنی بر نانولوله کربنی تک دیواره آرمیچر (5,5) و نانولوله های عامل دار با استخلاف آزومتین و کاتکول به منظور ایجاد حامل های دارورسانی انجام شده است. به منظور مطالعه بر روی این سیستم ها، محاسبات نظریه تابعی چگالی در سطح B3LYP و با سری پایه 6-31 G** مورد استفاده واقع شده است. تمام نتایج حاصل از محاسبه پارامترهای توپولوژی در فاز گاز و حلال و نمودارهای هومو و لومو در فاز گاز با هم مقایسه و بررسی شده اند. نانولوله ی عامل دار کاتکول در فاز حلال دارای کمترین گپ انرژی و دارای بیشترین مقدار پتانسیل شیمیایی، الکترون خواهی و نرمی شیمیایی است.

کلمات کلیدی:

نانو لوله عامل دار، آزومتین، کاتکول، DFT

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1005755>

