

# 7th International Conference on Science and Development of Nanotechnology



## بررسی اثر کایرالیتی بر روی قابلیت حمل دارو توسط نانولوله های نیتريد بور

آتنا انوری<sup>۱</sup>، محمد ماهانی<sup>۲</sup> مهدی یوسفیان<sup>۳</sup>

1-دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته کرمان، 2-دانشیار، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته کرمان، 3- دانشیار، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته کرمان

### چکیده

پیشگیری، تشخیص و درمان سرطان به عنوان یک هدف و دغدغه در علم پزشکی بوده است. شیمی درمانی یکی از مهمترین روش ها در درمان سرطان است. در طول سال های اخیر پیشرفت های چشمگیری در بهبود شیمی درمانی با به کارگیری نانو حامل های گوناگون برای انتقال هدفمند و کنترل شده عوامل ضد سرطانی صورت گرفته است. در این بین نانو حامل ها برخی خواص منحصر به فرد نانولوله های کربنی به ویژه نانو لوله های کربنی تک دیواره آن ها را به یکی از کارآمدترین ابزارها در تشخیص و درمان سرطان تبدیل کرده است. به غیر از نانولوله های کربنی، انواع دیگر نانولوله ها مانند نانولوله های نیتريد بور (BNNTs) کانون توجه مهمی بوده است. کپسوله کردن دارو درون نانولوله یکی از روش های مهم در حمل دارو و رسیدن به بافت است که می تواند توسط نانولوله انجام شود لذا از جمسیتابین درون نانولوله برای کپسوله کردن استفاده شد. در این مقاله سه نوع نانولوله نیتريد بور تک جداره آرمچر (۸و۸) و کایرال (۱۲و۳) و زیگزاگ (۱۴و۰) و روند آنها در کپسوله کردن داروی ضد سرطان جمسیتابین بررسی شد. بر اساس انرژی جذب دارو در نانولوله ها، دارو در زیگزاگ پایدار است. و طبق نمودارهای Dos هر سه به عنوان حامل برای کپسوله کردن داروی ضد سرطانی جمسیتابین انتخاب شدند. بررسی اثر کایرالیتی بر روی قابلیت حمل دارو توسط نانولوله های نیتريد بور از طریق نظریه تابعی چگال DFT انجام شده است. محاسبات در سطح B3LYP/6-311++G(d,p) و با استفاده از نرم افزار Gaussian 09 انجام گردید.

**واژگان کلیدی:** نانولوله نیتريد بور، کایرالیتی، نانوحامل، جذب سطحی، داروی جمسیتابین