



چهارمین همایش شیمی، مهندسی شیمی و نانو ایران، دانشگاه تهران

محاسبه ضریب انبساط حرارتی نانولوله های کربنی تک دیواره به منظور دارورسانی و درمان گرمانوری سرطان

مرادی، زینب^۱؛ واعظ زاده، مجید^۱؛ سعیدی، محمدرضا^۲

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی: zeinabmoradi1991@gmail.com

^۲استاد، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی: majid@kntu.ac.ir

^۳استادیار، دانشکده علوم، دانشگاه شاهد: m.saeidi@shahed.ac.ir

چکیده

نانولوله های کربنی تک دیواره (SWNTs) با توجه به خواص فیزیکی و شیمیایی منحصر به فردشان به یکی از کاندیدهای اصلی برای دارورسانی و درمان گرمانوری سرطان تبدیل شده اند. SWNT ها جذب نوری زیاد در محدوده فروسرخ نزدیک (NIR) از خود نشان می دهند و به وسیله جذب نور باعث ایجاد حرارت می شوند، در این صورت مطالعه خواص حرارتی نانولوله های کربنی اهمیت می یابد. هدف از ارائه این مقاله محاسبه تغییرات دمایی ضریب انبساط حرارتی SWNT ها می باشد. برهم کنش های بین اتم های کربن به وسیله پتانسیل بس ذره ای برنر و مدل نوسانگر هارمونیک توصیف شده است. نتایج نشان می دهد که ضریب انبساط حرارتی (CTE) نانولوله های تک دیواره در رنج دمایی صفر کلوین تا ۶۰۰ کلوین مثبت می باشد و با افزایش دما، قطر و طول SWNT ها افزایش می یابد، این نتایج می توانند یکی از عوامل مهم رها شدن دارو از SWCNT ها در اثر حرارت تولید شده توسط تابش لیزر باشد.

کلمات کلیدی

نانولوله های کربنی تک دیواره، دارورسانی و درمان گرمانوری سرطان، ضریب انبساط حرارتی، پتانسیل برنر، تابش لیزر (NIR).

Calculation of Thermal expansion coefficient of carbon nanotubes in order to drug delivery and cancer photothermal therapy

Moradi, Zeinab¹; Vaezzadeh, Majid¹; Saeidi, Mohammadreza²

¹Student of M.Sc., Faculty of Physics, K. N. Toosi University of Technology

² Professor, Faculty of Physics, K. N. Toosi University of Technology

³ Assistant Professor, Faculty of Basic Sciences, Shahed University

ABSTRACT

Single-wall carbon nanotubes (SWNTs) due to their unique physical and chemical properties have become strongest candidates mainly in drug delivery and cancer photothermal therapy. SWNTs exhibit strong optical absorption in the near-infrared (NIR) regions and generated heat by light absorption; in this case, studying of the thermal properties of nanotubes are important. The purpose of this paper is calculation the coefficient of thermal expansion (CTE) of SWNTs. The interactions of the carbon atoms in SWNTs are described by Brenner many-body potential and harmonic oscillator model. The results show that the CTEs of SWNTs are positive in a wide range of temperature; therefor length and diameter of SWNTs increase with increasing temperature. These results could be one of the important reasons for the release of drug from nanotube by absorption of light.

KEYWORDS

Single-wall carbon nanotube, Drug delivery and cancer photothermal therapy, Coefficient of thermal expansion, Brenner potential, NIR laser irradiation.