الخلاصة:

الهدف الرئيسي من هذه الدراسة هو التحقيق نظريا" للخصائص الإلكترونية المختلفة للمواد النانوية ثنائية الأبعاد(ZnONS, GNS, BL(MoS_2 , $MoSe_2$, WS_2, and WSe_2) والتي استخدمت كناقل للعلاجات المختلفة المضادة للسرطان (5-FU, 6-MP, GB, CP, and β-lap) . تتضمن الدراسة ستة اجزاء نظرية وتستند جميع التحقيقات إلى حسابات النظرية الوظيفية للكثافة (DFT).

الجزءالاول من هذه الدراسة اهتم بدراسة الخصائص الالكترونية لجزيئات العلاج المضادة للسرطان (5-FU, 6-MP, GB, and CP) . اوضحت النتائج ان جزيئة العلاج 5-FU يمتلك سلوك مادة عازلة -ولكن 6-MP, GB, CP, and β-lap لها سلوك مادة أشباه الموصلات بالإضافة إلى أن هذه الجزيئات لها تفاعل أكبر مع الهياكل الأخرى.

في الجزء الثاني ووفقًا للنتائج المكتسبة ، يعد ZnONS الأصلي طريقًا واعدًا لنقل العديد من الأدوية المضادة للسرطان (5-FU, 6-MP, GB, and CP). ومن المثير للاهتمام ، أن 5-FU/pristine ZnONS و6-MP/pristine ZnONS تمتلك سلوك أشباه الموصلات مع الانتقال المباشر عند النقطة Γ ، لكن GB/pristine ZnONS و CP/pristine ZnONS تمتلك فجوة طاقة إلكترونية صغيرة جدًا عند النقطةΓ -وان هذه الهياكل المعقدة لها سلوك شبه معدنية. بالإضافة إلى ذلك ، أصبحت جميع الهياكل المعقدة أكثر استقرارًا وأقل تفاعلًا. باختصار فان pristine ZnONS يعتبر افضل ركيزة لتوصيل دواء GB المضاد للسرطان مقارنة بالأدوية المضادة للسرطان الأخرى.

اما في الجزء الثالث، تم استخدام الشوائب المعدنية (Ag, Au, Cu, Pd, Pt, and Ni) مع ZnONS لتوصيل عقار مضاد للسرطان 5-FU. هناك نتائج مثيرة للغاية. تعتمد عملية الامتزاز على نوع الشوائب والمسافة بين جزيئة 5-FU و ZnONS المشبع بالمعادن. لذلك ، أصبح الامتزاز أقوى من خلال تقليل المسافة بين هذا الجزيئة و ZnONS المشبع بالمعادن. إلى جانب ذلك ، تصبح جميع الهياكل المعقدة أكثر استقرارًا وأقل تفاعلًا مقارنةً بـ ZnONS الأصلي. بعد ذلك ، يمكن استخدام الركيزة الجديدة (metal-doped ZnONS) كحامل لجزيئة 5-FU.

يركزالجزء الرابع على استبدال تركيزات مختلفة من ذرات الزنك Zn بشوائب Ga على سطح ZnONS في الاتجاهين العمودي والأفقي ، والتي تستخدم لحمل الأدوية المضادة للسرطان (5-FU, 6-MP, GB, and CP). أظهرت هذه الدراسة أن الخصائص الإلكترونية لا تعتمد فقط على نوع

جزيء الدواء ، ولكنها تعتمد أيضًا على اتجاه التصاق جزيئة العلاج في ال nGa-ZnONS. اظهرت النتائج ان الخصائص الإلكترونية لـ nGa- ZnONS حساسة جدًا لجزيئات الدواء في الاتجاه الأفقي أكثر من الاتجاه العمودي.

اما في الجزء الخامس من الدراسة ، تم استخدام pristine GNS والمعادن (Pd، Pt، Au ، و Ni) المشوبه لل GNS كناقل للأدوية المضادة للسرطان (5-FU, 6-MP, GB, and CP). غيرت هذه الشوائب سلوك GNS من المعدن إلى شبه المعدن. أصبحت GNS المغطاة بالمعادن والأدوية المضادة للسرطان المتمركزه فوق ال pristine GNS أكثر استقرارًا وتفاعلية أقل. تمت إعادة تأهيل وفتح فجوة النطاق الإلكترونية للأدوية المضادة للسرطان المتمركزه فوق pristine GNS. وأظهرت النتائج ايضا" أن pristine GNS وPt-doped GNS هي أفضل ركيزة لحمل العلاج المضاد للسرطان نوع GB مقارنة مع metal-doped ZnONS. بالإضافة إلى ذلك ، فإن GNS المشوب ب (Au أو Ni) هو أفضل ركيزة لتوصيل الدواء المضاد للسرطان نوع CP.

اما في الجزء الاخير من الدراسة تضمن استخدام مواد نانويه اخرى وهي BL(MoS_2, $MoSe_2$, WS_2, and WSe_2)) لنقل جزيئة العلاج المضاد للسرطان β-lap وذلك عن طريق وضع هذا العلاج فوق الواح المواد النانوية. أظهرت النتائج أن MSe_2 وMS_2 لهما سلوك أشباه الموصلات مع فجوات طاقة إلكترونية غير مباشرة. ايضا" اظهرت النتائج ان المركبات β-lap/WSe_2 and β-lap/$MoSe_2$ يمتلكان فجوة طاقة صغيرة مع انتقال مباشر للالكترونان عند النقطة k ومنطقة Γ-K على الوالي . بينما المركبات β-lap/MoS_2 و β-lap/WS_2 فان فجوة الطاقة ايضا" اصبحت صغيره مع انتقال غير مباشر للالكترونات في المنطقة Γ-M. اما استقرارية هذه المركبات فبينت النتائج ان هذه المركبات اصبحت اكثر استقرارا" واقل تفاعلا". في هذه المرحلة ، يمكن استخدام WS_2 كركيزة لنقل العلاج β-lap مقارنة بالمواد النانوية الاخرى . هذه النتائج تحفز وتشجع الباحثين في المجال العملي على تصميم هذه المركبات الجديدة لنقل العلاج β-lap.