الخلاصة:

الهدف الرئيسي من هذه الدراسة هو التحقق من الخصائص الإلكترونية المختلفة للمواد النانوية أحادية الأبعاد (SWZBNNTs, SWZCNTs, SWZZnONTs, SWAZnONTs, وSWCMoS$_2$NTs)، والتي تستخدم كحامل لمختلف العلاجات المضادة للسرطان (FU-5، CH، CY، OX, HY). تعتمد جميع تحقيقاتنا على استخدام نظرية ال (DFT). بعد حساب الخصائص الإلكترونية لهذه العلاجات المضادة للسرطان، تبين ان جميع هذه العلاجات المضادة للسرطان لها سلوكيات عازلة، لكن CY له سلوك أشباه الموصلات. بالإضافة الى ذلك فإن هذه الأدوية المضادة للسرطان لها تفاعل أكبر مع الهياكل الأخرى

باستخدامنا الـ SWZCNTs وSWZBNNTs كناقل للعلاجات المضادة للسرطان (CH، CY، وFU-5). أشارت النتائج إلى أن هذه الأنابيب لها سلوك شبه موصل وأن فجوة النطاق الإلكتروني تزداد مع زيادة قطر الأنبوب، باستثناء SWZCNTS (6,0) لديه سلوك معدني مع فجوة نطاق إلكترونية صفر. ونظرًا لتزايد الطاقة الإجمالية مع زيادة القطر، تصبح هذه الأنابيب أكثر استقرارًا وأقل تفاعلاً. أظهرت النتائج أن هياكل المجمعات لديها فجوة نطاقية إلكترونية أقل من أصل هذه الأنابيب. من خلال امتصاص نفس العلاج المضاد للسرطان على SWZCNTs وSWZBNNTs، اكتشفنا أن المركب SWZBNNTs/drugs له نتائج مثيرة للاهتمام مقارنة مع SWZCNTs. لذلك، تم تقليل فجوة النطاق الإلكتروني بالنسبة للمركب مقارنةً بالأنابيب الأصلية. كما أن SWZBNNTs/drugs أكثر استقرارًا مقارنةً SWZCNTS/drugs. تزداد طاقة الامتزاز بزيادة قطر الأنبوب مع العلاج المضاد للسرطان، باستثناءFU-5/(7,0)SWZBNNTs لها سلوك معاكس. بعد ذلك، أدركنا أن SWZBNNTs (11,0) هي أفضل ركيزة لنقل العلاج (CH) المضاد للسرطان، نظرًا لأنها تتمتع بقيمة أعلى لطاقة الامتصاص E_{ads} مقارنة بالآخرين. باختصار، اكتشفنا أن SWZBNNTs هي أفضل ركيزة لتوصيل هذه الأدوية المضادة للسرطان مقارنةً بـ SWZCNTs.

بعد ذلك تم استخدام أقطار مختلفة من ZSWZnONTs وASWZnONTs كناقل لـ HY المضادة للسرطان في المواقع الداخلية والخارجية لهذه الأنابيب. تشير النتائج إلى ان $(n,0)$ SWZZnONTs $(where\ n = 8\ to\ 12)$ and (n,m) SWAZnONTs $(where\ n = 8\ to\ 12\ ;\ m)$ لها سلوكيات أشباه الموصلات وأن فجوة النطاق الإلكتروني تتزايد مع زيادة قطر الأنبوب.

في حالة كون العلاج داخل الانبوب، بينت النتائج ان المركب ZSWZnONTs HY/(12,0) اكثر استقرارا" مقارنةً بأنابيب HY/ZSWZnONTs الأخرى ولا تزال تتمتع بسلوك أشباه الموصلات. وهذا يعني أن هذا العلاج المضاد للسرطان أصبح أكثر استقرارًا عندما وضعناه في القطر الأعلى للأنبوب. وتم تأكيد هذه النتيجة باستخدام ASWZnONTs.بالإضافة لذلك اكتشفنا أن جميع الهياكل المعقدة في المواقع الداخلية تتطلب طاقة إثارة أقل لنقل الإلكترونات بسبب زيادة الصلابة الكيميائية لـ HY/(ZSWZnONTs) أو ASWZnONTs). بالنسبة للمواقع الخارجية، اكتشفنا السلوك المعاكس، باستثناء HY/(12,0)ZSWZnONTs وHY/(10,10)ASWZnONTs لهما السلوك العكسي.

يمتلك علاج HY المضاد للسرطان تفاعلًا ضعيفًا مع ZSWZnONTs وASWZnONTs ،وبذلك يعد (12,0) and (12,12) أفضل ركيزة لحمل علاج HY المضاد للسرطان.

وبعد ذلك تم عمل آخر مثير للاهتمام من خلال استخدام (3,2) و $SWCMoS_2NTs$ (4,2)لتوصيل علاج OX المضاد للسرطان مع وجود وبدون وجود شوائب ومواقع مختلفة على مسافات مختلفة بينهما. تم اكتشف أن $SWCMoS_2NTs$ (3،2) و (4،2) لها سلوك أشباه الموصلات وأن انتقال الإلكترونات يقع عند نقطتي Γ و Z لـ (3،2) و (4،2) $SWCMoS_2NTs$، على التوالي. يتمتع الهيكل المعقد (OX/(3,2) $SWCMoS_2NTs$) بسلوك شبه معدني مع انتقال مباشر للإلكترونات عند النقطة Γ. هناك نتائج مثيرة للاهتمام للغاية من خلال تغيير ذرة S بشوائب P أو Ga. لذلك، فإن الهيكل (OX/p-doped (3,2) $SWCMoS_2NTs$) له سلوك أشباه الموصلات من النوع n عندما تكون المسافة بين عقار OX المضاد للسرطان و p-doped (3,2) $SWCMoS_2NTs$ هي 1.76 Å مقارنة بالمسافات الأخرى. من خلال استخدام شوائب Ga، تم اكتشاف أفضل النتائج عند 1.42 Å وأصبح السلوك سلوكًا من النوع p وأكثر استقرارًا مقارنة بالسلوكيات الأخرى. بالنسبة لـ (OX/(4,2) $SWCMoS_2NTs$) له سلوك معدني. باستخدام شوائب P على مسافات مختلفة، يتغير السلوك من المعدن إلى شبه المعدن مع الانتقال المباشر عند النقطة Z. أصبح سلوك هذا الهيكل المعقد أشباه الموصلات من النوع n عند 1.76 Å. بالنسبة لـ (OX/Ga-doped (4,2) $SWCMoS_2NTs$) على مسافة مختلفة له سلوك معدني. وبذلك تبين ان هذه الانابيب مناسبة لنقل علاج OX بوجود الشوائب Ga وP .