بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران مرکز

دانشکده علوم پایه گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد

گرایش:معدنی

عنوان:

بررسی ساختارهای الکترونی نانو مواد در برهم کنش های با مولکول های کوچک بیولوژیکی در یک مدل سازی کامپیوتری

استادراهنما:

دکتر آذر باقری قمی

استادان مشاور:

دکتر رویا احمدی

نکارش:

آذین وین

زمستان ۹۱

تقدیم به خانواده ی مهربانم به خاطر همه محبت ها و حمایت هایشان ، که همیشه تکیه گاهی محکم و مطمئن برای من بوده اند.

پروردگارا

ادای شکر تو را هیچ زبان نیست و دریای فضل تو را هیچ کران نیست و سر حقیقت تو بر هیچ کس عیان نیست، هدایت کن بر ما رهی که بهتر از آن نیست.

از استادان بزرگوار و ارجمندم ، خانم دکتر آذر باقری قمی و خانم دکتر رویا احمدی که در نگارش این پایان نامه مرا یاری کردند و از زحمات و تلاش های بی شائبه این دو عزیز کمال تشکر را دارم.

تعهد نامه اصالت پایان نامه کارشناسی ارشد

اینجانب آزین وین دانش آموخته مقطع کارشناسی ارشد نا پیوسته به شماره دانشجویی۸۹۰۹۴۱۵۳۲۰۰ در رشته شیمی معدنی که در تاریخ ۹۱/۱۱/ ۱۷
از پایان نامه خود تحت عنوان : بررسی ساختارهای الکترونی نانومواد در برهمکنش با مولکول های کوچک بیولوژیکی در یک مدل سازی کامپیوتری . با کسب نمره ۱۸ و درجه بسیار خوب دفاع نموده ام بدینوسیله متعهد می شوم :
۱- این پایان نامه حاصل تحقیق و پژوهش انجام شده توسط اینجانب بوده و در مواردی که از دستاوردهای علمی و پژوهشی دیگران (اعم از پایان نامه ، کتاب ، مقاله و ...) استفاده نموده ام ، مطابق ضوابط و رویه های موجود ، نام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آن را در فهرست ذکر و درج کرده ام .
۲- این پایان نامه قبلاً برای دریافت هیچ مدرک تحصیلی (هم سطح ، پایین تر یا بالاتر) در سایر دانشگاهها و موسسات آموزش عالی ارائه نشده است .
۳- چنانچه بعد از فراغت از تحصیل ، قصد استفاده و هرگونه بهره برداری اعم از چاپ کتاب ، ثبت اختراع و ... از این پایان نامه داشته باشم ، از حوزه معاونت پژوهشی واحد مجوزهای مربوطه را اخذ نمایم .
۴- چنانچه در هر مقطع زمانی خلاف موارد فوق ثابت شود ، عواقب ناشی از آن را بپذیرم و واحد دانشگاهی مجاز است با اینجانب مطابق ضوابط و مقررات رفتار نموده و در صورت ابطال مدرک تحصیلی ام هیچگونه ادعایی نخواهم داشت .

نام و نام خانوادگی : آزین وین

تاریخ و امضاء :

بسمه تعالی

درتاریخ : ۱۳۹۱/۱۱/۱۷

دانشجوی کارشناسی ارشد آقای / خانم آزین وین از پایان نامه خود دفاع نموده و با نمره ۱۸ بحروف هجده و با درجه بسیار خوب مورد تصویب قرار گرفت .

امضاء استاد راهنما

بسمه تعالی

دانشکده علوم پایه

××

(این چکیده به منظور چاپ در پژوهش نامه دانشگاه تهیه شده است)

نام واحد دانشگاهی: تهران مرکزی **کد واحد:** ۱۰۱	**کد شناسایی پایان نامه: ۱۰۱۳۰۳۰۶۹۱۱۰۰۲**
عنوان پایان نامه: بررسی ساختارهای الکترونی نانو مواد در برهم کنش با مولکول های کوچک بیولوژیکی در یک مدل سازی کامپیوتری	
نام و نام خانوادگی دانشجو: آزین وین **شماره دانشجویی: ۸۹۰۹۴۱۵۳۲۰۰** **رشته تحصیلی: شیمی معدنی**	**تاریخ شروع پایان نامه: ۹۱/۳/۲۰** **تاریخ اتمام پایان نامه: ۹۱/۱۱/۱۷**
استاد / استادان راهنما: دکتر آذر باقری قمی **استاد / استادان مشاور: دکتر رویا احمدی**	
آدرس و شماره تلفن: خیابان میرداماد ، خیابان نسا، کوچه ی دهم ۲ ، پلاک ۱۲ ، واحد ۱ **۲۲۲۷۸۹۵۲**	

چکیده پایان نامه (شامل خلاصه، اهداف، روش های اجرا و نتایج به دست آمده) :

یکی از کاربردهای نانو تکنولوژی ، استفاده از نانوتیوب های کربنی برای انتقال مولکول های دارویی به هدف است.
برای نشان دادن خواص فیزیکی و شیمیایی بیو مولکول ها و شناسایی خواص جدید دارویی ، برهم کنش نانوتیوب های کربنی (CNTs) با بیومولکول ها موضوع بسیاری از بررسی هاست.
CNTs یک ترکیب سنتزی با خواص مکانیکی ، حرارتی ، الکتریکی ، نورشناختی و خواص شیمیایی است که به طور گسترده درصنعت استفاده می شود.
در این مطالعه ما سعی کردیم پارامترهای ترمودینامیکی ، NBO، NMRو مطالعات IRداروی ضد سرطانی کومارین (۳- استیل ٤- هیدروکسی ٦- متیل کومارین) که با نانوتیوب کربنی تک دیواره (SWCNT) برهم کنش داده است توسط محاسبات نظریه تابع چگالی (DFT) بررسی کنیم.
در این پروژه ، نکته حائز اهمیت این است که نتایج حاصل از محاسباتی نشان می دهد که کومارین متصل به نانوتیوب تک دیواره (SWCNT) یک ترکیب مناسب برای دارو رسانی است.

نظر استاد راهنما برای چاپ در پژوهش نامه دانشگاه مناسب است ☐ تاریخ و امضاء:

مناسب نیست ☐

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

چکیده .....س

فصل اول:

مقدمه.....۱

فصل دوم : مطالعات نظری

نگاهی کلی براین فصل ۶

۲.-۱ مکانیک مولکولی ۷

۲-۲ مکانیک کوانتومی..... ۸

۲-۳ طبقه بندی روش ها.....۹

۲-۴ مجموعه پایه..... ۱۲

۲-۵ انواع مجموعه پایه ۱۳

۲-۶توابع موج هارتری فاک..... ۱۶

۲-۷ نظریه ی تابعی- دانسیته ۱۸

۲-۷-۱ قضیه ی Hohenberg-Kohn ۱۸

۲-۷-۲ روش Kohn-Sham ۱۹

۲-۸ عبارت انرژی Kohn-Sham ۱۹

۲-۹ تابع انرژی تبادلی – همبستگی ۲۰

۲-۱۰ قابلیت DFT ۲۱

۲-۱۱ نظریه ی اختلال ۲۳

۲-۱۲ چگونگی انجام محاسبات شیمی کوانتومی.....۲۴

۲-۱۳ انرژی ها.....۲۴

۲-۱۴ خواص مولکولی.....۲۵

۲-۱۵ تعاریف مختلف از فناوری نانو.....۲۶

۲-۱۶ برخی اهداف فناوری نانو..... ۲۷
۲-۱۷ اهمیت نانو ابعاد..... ۲۷
۲-۱۸ تفاوت فناوری نانو با فناوری های دیگر..... ۲۸
۲-۱۹ عناصر پایه..... ۲۸
۲-۲۰ شاخه های فناوری نانو..... ۲۹
۲-۲۰-۱ نانو فناوری مرطوب..... ۳۰
۲-۲۰-۲نانو فناوری خشک..... ۳۰
۲-۲۰-۳نانوفناوری محاسباتی..... ۳۱
۲-۲۱روش های ساخت در فناوری نانو..... ۳۱
۲-۲۲ نانوتیوب ها..... ۳۲
۲-۲۳ دامنه کاربرد..... ۳۳
۲-۲۴مشخصات ۳۴
۲-۲۵روشهای تولید نانو تیوب کربنی..... ۳۴
۲-۲۶روش قوس الکتریکی..... ۳۵
۲-۲۷روش میدان مغناطیسی..... ۳۷
۲-۲۸روش تحت یون زدایی آب..... ۳۸
۲-۲۹دارو رسانی به وسیله نانو تیوبهای کربنی..... ۳۸
۲-۳۰خلق نانوتیوپهای کربنی ابر رسانا ۴۰
۲-۳۱ مروری بر پژوهش های گذشته در مورد کومارین..... ۴۱
۲-۳۲فناوری نانو در دارورسانی..... ۴۲
۲-۳۳ نانوذرات..... ۴۳
۲-۳۴ بارگذاری دارو..... ۴۴
۲-۳۶کاربرد پزشکی کومارین..... ۴۵
۲-۳۷ سمیت کومارین ۴۵
۲-۳۸ ساختار و واکنش های کومارین..... ۴۶
۲-۳۹بنزوپیرون ها..... ۴۷
۲-۴۰ انواع کومارین..... ۴۸
۲-۴۱متابولیسم های کومارین..... ۵۲
۲-۴۲کاربرد کومارین ساده در درمان سرطان ۵۳
۲-۴۳ تاریخچه تحقیق در مورد نانوداروها..... ۵۳

فصل سوم: روش تحقیق

نگاهی کلی بر این فصل ۵۸
۳-۱برنامه ها ی گوسین ۵۹
۳-۲ورودی گوسین ۹۸..... ۵۹
۳-۳ انواع ورودی گوسین ۶۰
۳-۴ شیمی مدل..... ۶۱
۳-۵ فرکانس..... ۶۲
۳-۶ معرفی نرم افزار Chem office..... ۶۲
۳-۷ دستورات گوسین ۶۳
۳-۸ دستور NBO..... ۶۴
۳-۹ دستور NMR..... ۶۴
۳-۱۰ اوربیتال های Homo و Lumo ۶۵
۳-۱۱ مروری بر مطالعات و کارهای انجام شده..... ۶۵

فصل چهارم: تجزیه و تحلیل یافته های تحقیق

نگاهی کلی بر این فصل ۶۸
۴-۱ نتایج ۶۹
٤-۲ محاسبات مرتبط به بهینه سازی در تراز محاسباتی..... ۷۳
٤-۲-۱ محاسبات مربوط به بار ۷۳
٤-۲-۲ محاسبات مربوط به انرژی ها..... **۸۳**

٤-٢-٣ محاسبات مربوط به روابط انرژی.....**٨٨**
٤-٢-٤ محاسبات مربوط به قطبیت ٨٨
٤-٢-٥ محاسبات مربوط به طول و زوایای پیوند.....٩٠
٣-٤ محاسبات مربوط به NMR ٩٤
٤-٤محاسبات مربوط به جابه جایی شیمیایی.....٩٧
٤-٥محاسبات مربوط به σ ایزوتروپی..... ٩٨
٤-٦محاسبات مربوط به میزان مشارکت اوربیتال.....١٠٢
٤ -٧ نمودار تراز انرژی اوربیتال مولکولی.....١٠٦
٤-٨ نمایش سطح اوربیتال مولکولی.....١٠٩

فصل پنجم:

نگاهی کلی بر این فصل ١١٢
٥-١نتایج بررسی ممان دو قطبی.....١١٣
٥-٢نتایج بررسی زوایا، طول پیوند.....١١٣
٥-٣بررسی گپ انرژی و سختی شیمیایی ١١٤
٥-٤نتایج بررسی انرژی اتصال..... ١١٤
٥-٥نتایج بررسی پتانسیل شیمیایی..... ١١٤
٥-٦نتایج بررسی میزان بار.....١١٥
٥-٧ نتایج مربوط به اوربیتال های Homo.....١١٩
٥-٨نتایج مربوط به اوربیتال های Homo.....١٢٢

مراجع ١٢٦

چکیده انگلیسی.....١٣٠

فهرست جداول

جدول ۲-۱..... ۲۲
جدول ۲-۲..... ۴۹
جدول ۲-۳..... ۵۳
جدول ٤-١..... ۷۳
جدول۴-۲..... ۷۶
جدول۴-۳..... ۷۸
جدول۴-۴..... ۷۹
جدول۴-۵..... ۸۰
جدول۴-۶..... ۸۱
جدول۴-۷..... ۸۱
جدول۴-۸..... ۸۲
جدول۴-۹..... ۸۵
جدول۴-۱۰..... ۸۸
جدول۴-۱۱..... ۸۹
جدول۴-۱۲..... ۹۰
جدول۴-۱۳..... ۹۰
جدول۴-۱۴..... ۹۱
جدول۴-۱۵..... ۹۲
جدول۴-۱۶..... ۹۷
جدول۴-۱۷..... ۹۸
جدول۴-۱۸..... ۹۹
جدول۴-۱۹..... ۱۰۰
جدول۴-۲۰..... ۱۰۲
جدول۴-۲۱..... ۱۰۵
جدول۵-۱..... ۱۱۷
جدول۵-۲..... ۱۱۸

فهرست نمودارها

نمودار۴-۱..... ۸۶
نمودار۴-۲..... ۸۶
نمودار۴-۳..... ۸۷
نمودار۴-۴..... ۸۷
نمودار۴-۵..... ۸۹
نمودار۴-۶..... ۱۰۱
نمودار۴-۷..... ۱۰۱
نمودار۴-۸..... ۱۰۲
نمودار۴-۹..... ۱۰۶
نمودار۴-۱۰..... ۱۰۶
نمودار۴-۱۱..... ۱۰۷
نمودار۴-۱۲..... ۱۰۷
نمودار۴-۱۳..... ۱۰۸
نمودار۴-۱۴..... ۱۰۸
نمودار۵-۱..... ۱۱۵
نمودار۵-۲..... ۱۱۵
نمودار۵-۳..... ۱۱۶
نمودار۵-۴..... ۱۱۶
نمودار۵-۵..... ۱۱۷
نمودار۵-۶..... ۱۱۸

فهرست اشکال

شکل ۲-۱ ..... ۴۷
شکل ۲-۲ ..... ۴۸
شکل ۲-۳ ..... ۵۱
شکل ۲-۴ ..... ۵۲
شکل۴-۱..... ۶۹
شکل۴-۲..... ۷۰
شکل۴-۳..... ۷۱
شکل۴-۴..... ۷۲
شکل۴-۵..... ۸۳
شکل۴-۶..... ۸۴
شکل۴-۷..... ۸۴
شکل۴-۸..... ۹۴
شکل۴-۹..... ۹۴
شکل۴-۱۰..... ۹۵
شکل۴-۱۱..... ۹۵
شکل۴-۱۲..... ۹۶
شکل۴-۱۳..... ۹۶
شکل۴-۱۴..... ۱۰۶
شکل۴-۱۵..... ۱۰۷
شکل۴-۱۶..... ۱۰۸
شکل۴-۱۷..... ۱۰۹
شکل۴-۱۸..... ۱۱۰
شکل۵-۱..... ۱۱۹
شکل۵-۲..... ۱۲۰
شکل۵-۳..... ۱۲۰
شکل۵-۴..... ۱۲۲
شکل۵-۵..... ۱۲۳
شکل۵-۶..... ۱۲۴

چکیده:

یکی از کاربردهای نانو تکنولوژی ، استفاده از نانوتیوب های کربنی برای انتقال مولکول های دارویی به هدف است.

برای نشان دادن خواص فیزیکی و شیمیایی بیو مولکول ها و شناسایی خواص جدید دارویی ، برهم کنش نانوتیوب های کربنی (CNTs) با بیومولکول ها موضوع بسیاری از بررسی هاست.

CNTs یک ترکیب سنتزی با خواص مکانیکی ، حرارتی ، الکتریکی ، نورشناختی و خواص شیمیایی است که به طور گسترده درصنعت استفاده می شود.

در این مطالعه ما سعی کردیم پارامترهای ترمودینامیکی ، NBO، NMR و مطالعات IR داروی ضد سرطانی کومارین (۳- استیل ٤- هیدروکسی ٦- متیل کومارین) که با نانوتیوب کربنی تک دیواره (SWCNT) برهم کنش داده است توسط محاسبات هارتری فاک (HF) بررسی کنیم.

در این پروژه ، نکته حائز اهمیت این است که نتایج حاصل از محاسباتی نشان می دهد که کومارین متصل به نانوتیوب تک دیواره (SWCNT) یک ترکیب مناسب برای دارو رسانی است.

مقدمه:

نانو مواد استفاده های متعددی از بعد پزشکی و داروسازی دارند] بسیاری از داروها که ظرفیت بالای درمانی دارند به خاطر عوارض جانبی و یا مشکل تولیدشان به شکلی که به راحتی قابل واگذاری به بیماران باشند] توسعه نمی یابند. حصول اطمینان از اینکه دارو به بافت یا بخش مورد نظر بدن بیمار هدایت شود] یکی از مهم ترین مسائل دنیای پزشکی است.

با فناوری نانو می توان به دارورسانی هدفمند دست یافت و زمان، مکان و سرعت آزادسازی دارو را کنترل نمود.

سیستم های دارورسانی جدید عوارض جانبی کمتر، کارایی بیشتر و رضایت و راحتی بیمار را به دنبال خواهند داشت.

دارورسانی نوین عبارتست از رساندن دارو در یک زمان معین با دز کنترل شده به اهداف خاص که باعث کاهش عوارض جانبی، درمان سریعتر، و اختصاصی برای هر یک از افراد می باشد.

این شیوه دزهای مصرف را کاهش می دهدو باعث دلگرمی بیماران برای ادامه رژیم مصرف دارویی می شود.

دارورسانی موفقیت های چشمگیر خود را مدیون نانوذرات می باشد که نانوذرات به نوبه خود دارای خصوصیاتی مانند ظرفیت بالا برای حمل دارو، اندازه مناسب برای عبور از سطوح خونی، قابلیت تجمع در بافت هدف و سطح فعال بسیار وسیع برای واکنش و سمیت پایین هستند.

بنابراین پوشاندن دارو با مولکول های مختلف اجازه می دهد دارو خیلی اسان تر به غشاهای سلولی وارد شود. پژوهشگران به تازگی در یافته اند که شکل خاصی از مولکولهای کربن می توانند به خوبی وارد هسته سلولها شوند ومی توان از آنها درسیستم دارسازی وواکسیناسیون استفاده کرد. امروزه این مولکولهای کربن که نانو تیوبهای کربن نامیده می شوند] در درمان سرطان ،ژن درمانی وواکسیناسیون استفاده می شود.

در این تحقیق با استفاده از یک مدل سازی کامپیوتری بر آنیم تا در مورد نحوه اتصال دارو به نانوتیوب اظهار نظر کنیم.

برهمکنش های نانو تیوب با بیو مولکول ها کاربردهای متعددی در زمینه الکترونیک] سنسورهای بیوشیمیایی] انتقال دارو] انتقال ژن و کاربردهای درمانی دارد.

داروی مطالعه شده در این تحقیق از دسته کومارین هاست.

کومارین ها یک دسته از ترکیبات شیمیایی آلی معطرمی باشند که در دسته ی ترکیبات بنزوپیرون قرار می گیرند. کومارین در حالت استانداردش یک ماده ی بلورین بدون رنگ است. این ترکیب به طور طبیعی در بسیاری از گیاهانی مثل کرفس، بابونه، دارچین و جعفری یافت می شود . کومارین را می‌توان در آزمایشگاه هم تولید کرد. کوماروین داروی ضد سرطان و نوعی ماده ضد انعقاد خون است. کومارین در صنعت دارویی به عنوان یک مولکول پیشرو در تولید تعدادی از داروهای ضد انعقاد خون استفاده می شود. کومارین همچنین در بعضی از لیزرهای رنگی استفاده می شود. کومارین را برای پیشگیری و درمان لخته‌های خون در رگ‌های خونی و برای درمان بیماری‌های خاص قلبی استفاده می‌کنند.

یکی از متداولترین برنامه ی کامپیوتری محاسبات شیمی کوانتومی ، سری گوسین است که می تواند تعدادی از خواص مولکول ها و واکنش ها شامل ساختار و انرژی های مولکول، انرژی های پیوند و واکنش ، اوربیتال های مولکولی، فرکانس های ارتعاشی ، بارهای اتمی ، پتانسیل های الکترواستاتیک و دانسیته ی الکترون ، مسیر واکنش ، خواص ترمو شیمیایی ، ساختار و انرژی های مولکول، ممان های چند قطبی ، خواص NMR ، قطبش پذیری ها و ... را پیش بینی کند.

محاسبات می تواند برروی سیستم های در حالت فاز گازی یا در محلول ، و در حالت پایه یا تحریکی اتفاق افتد. پس ،گوسین ۹۸ می تواند به عنوان ابزار قوی برای مکانیزم واکنش ها ، سطوح انرژی پتانسیل و انرژی های تحریکی به کار رود. گوسین ۹۸ در گستره ی وسیعی از مدل های تئوری تابع به کار می رود.

در این تحقیق با استفاده از یک مدل سازی کامپیوتری بر آنیم تا در مورد نحوه اتصال کومارین به نانوتیوب اظهار نظر کنیم.

با استفاده از محاسبات کامپیوتری ،فرکانس های ارتعاشی ،طیف NMR، خواص ترمو شیمیایی ، انرژی بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO)وانرژی پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (LUMO) را بررسی می کنیم و سپس نتیجه می گیریم آیا از این مدل سازی کامپیوتری می توان نتیجه گرفت که از نانو تیوب ها می توان در دارورسانی کمک گرفت یا خیر.

در محاسبات NBO، انواع هیبریدها ، پیوندهای سیگما ، میزان مشارکت پذیری اوربیتالهای P و اوربیتالهای HOMO و LUMO ، طول و زوایای پیوندی و همچنین بررسی ممان دوقطبی و تعیین مقدار انرژی پیوند بررسی و مقایسه می شود . در محاسبات NMR ،پارامترهای جابه جایی شیمیایی و برهمکنش های پوشیدگی شیمیایی در سه بعد $(\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33})$ و مقادیر عدد $\Delta\sigma$ و δ بدست می آید در نهایت جداولی طراحی شده و محاسبات فوق مقایسه و بحث و نتیجه گیری می شود.

هدف از این پژوهش بررسی برهمکنش بین داروی کومارین با نانوتیوب می باشد.

با توجه به اینکه داروها سایت های مختلفی برای اتصال به نانومواد دارند و اتصال می تواند از هر کدام از این جهات انجام شود] ما تمام مدل های مختلف را در نظر گرفته و سپس بررسی می کنیم از کدام جهت امکان برهم کنش بیشتر و بهتر است.

در این تحقیق ابتدا ایزومرهای مختلف را برای برهم کنش فوق در نظر گرفته و سپس با استفاده از نرم افزارهای مختلف مثل گوسین تاثیر نانوتیوب را بر ساختار الکترونی مولکول بیولوژیکی که داروی کومارین است در نظر می گیریم.

بر اساس تحقیقات انجام شده در این زمینه و در حیطه تئوری و با استفاده از محاسبات کامپیوتری وپارامترهایی که در بررسی ساختار الکترونی مولکول موثر است بررسی های لازم را برای این برهمکنش انجام می دهیم.

با فناوری نانو می توان به دارورسانی هدفمند دست یافت و زمان، مکان و سرعت آزادسازی دارو را کنترل نمود

لذا در این مطالعه به بررسی برهم کنش نانو مواد با مولکول های کوچک بیولوژیکی می پردازیم. نتایج این بررسی برای طراحی نانو مواد عامل دار شده] با مولکول های بیولوژیکی برای کاربردهای مختلف مفید است.

در این تحقیق ابتدا ایزومرهای مختلف را برای برهم کنش فوق در نظر گرفته و سپس با استفاده از نرم افزارهای مختلف مثل گوسین تاثیر نانوتیوب را بر ساختار الکترونی داروی کومارین در نظر می گیریم .

فصل دوم

مطالعات نظری

نگاهی کلی بر این فصل :

در این فصل به بررسی شیمی محاسباتی خواهیم پرداخت . در شیمی محاسباتی
به روش های مکانیک مولکولی و کوانتومی اشاره خواهیم کرد. در مورد چگونگی انجام محاسبات شیمی کوانتومی و انواع مجموعه های پایه در برنامه گوسین و انرژی ها و توابع مربوطه صحبت خواهیم کرد. سپس به بررسی فناوری نانو ونانوتیوب ها از جمله تعاریف مختلف از فناوری نانو، اهداف و اهمیت، شاخه های مختلف نانو،مشخصات، کاربردها ، فناوری نانو در دارو رسانی و ... می پردازیم. چون هدف ما در این تحقیق پیوند دادن نانو تیوب با دارو است ما به بررسی دارویی به نام کومارین که دارویی ضد سرطانی است خواهیم پرداخت که در آن به معرفی آن ، انواع آن ، سمیت کومارین ، کاربرد پزشکی کومارین، ساختار و واکنش های آن ، متابولیسم آن و ... خواهیم پرداخت . در آخر این فصل به پژوهش های گذشته در مورد نانو داروها و محققانی که در این زمینه کار کرده اند مروری خواهیم داشت.