**Геометрија, таутомерија и нековалентне интеракције лека Халофуфјуџинона са угљеничним наноцевима и** γ**-Fe2O3 наночестицама: DFT студија**

ШИМА КЕЈЗИРИ-ШЕНДИЗ, С. АЛИ БИЈРАМБЕДИ\* и АЛИ МАРСЕЛИ

*Одсек за Хемију, Мешхадски огранак, Исламски Азад Универзитет, Маешхад, Иран*

ИЗВОД

Халофјуџинон је потенцијално лек против маларије, који може да постоји у три могућа таутомера. Овде смо, користећи теорију функционала густине (*DFT*), и уводећи ефекте растварача помоћу *PCM* модела, истраживали таутомерију код Халофјуџинона. Интрамолекулске H-везе имају значајну улогу у стабилизацији таутомера. **H1a** је најстабилнији таутомер. Нековалентне интеракције **H1a** таутомера са столичастом (5,5) једнозидном угљеничном наноцеви и са γ-Fe2O3 наночестицом истраживане су на више начина. Одређен је њихов најстабилнији облик. Међумолекулске H-везе имају суштинску улогу у енергетском понашању интеракције γ-Fe2O3 наночестице и Халофјуџинона.

*Keywords*: Halofuginone; DFT; PCM; Tautomerism; γ-Fe2O3 nanoparticle; carbon nanotube.