سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
تعیین کوانتومی ساختارداروی تاموکسیفن و بررسی اثر آن بر نوع پیوند شدن با DNA

محل انتشار:
هفتمین کنفرانس بین المللی شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:
مریم نجات دهکردی - *گروه شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد شهرکرد، شهرکرد، ایران*

رضا صفری - *گروه شیمی (شیمی فیزیک)، دانشگاه قم، قم،ایران*

فاطمه شرفی بجگان - *گروه شیمی (شیمی فیزیک)، دانشگاه قم، قم،ایران*

خلاصه مقاله:
در این پژوهش، ساختار الکترونی داروی ضد سرطان تاموکسیفن، با استفاده از روش محاسباتی DFT/B3LYP-6-311G و براساس نظریه کوانتومی اتم در مولکول (QTAIM) مطالعه شد. همچنین، به منظور بررسی نظری عملکرد این دارو، مطالعات اسپکتروسکوپی UV-ViS بر روی آن انجام گرفت. داده های حاصل از برهمکنش داروی تاموکسیفن با DNA مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. نتایج طیف جذبی حاصل از اسپکتروسکوپی اثر هایپرکرومیسم و هایپوکرومیسم را نشان میدهد . بهعلاوه، اثر اعمال میدان الکتریکی خارجی بر روی داروی تاموکسیفن و سازوکار انتقال بار و انرژی درونمولکولی در این دارو مورد مطالعه محاسباتی قرار گرفت. باتوجه به قابلیت خوب توزیع بار و انرژیدرون مولکولی در داروی تاموکسیفن و نتایج اسپکتروسکوپی UV-Vis برهمکنش داروی تاموکسیفن با DNA (در اکثر جایگاه های DNA) قابل توجه می باشد.

کلمات کلیدی:
تاموکسیفن، DNA، نظریه تابعی چگال،نظریه کوانتومی اتم در مولکول، اسپکتروسکوپی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1040725