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

عنوان مقاله:
بررسی خواص الکترونی و میزان واکنش پذیری ساختار داروی لورازپام به روش تحلیل NBO

محل انتشار:
هشتمین کنفرانس بین المللی شیمی ، مهندسی شیمی و نفت (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 12

نویسندگان:
معصومه شاهی - *دانشکده شیمی دارویی، علوم پزشکی تهران، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران*

سپیده شکری شمس - *دانشکده شیمی دارویی، علوم پزشکی تهران، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران*

فاطمه آذرخشی - *گروه شیمی، واحد ورامین - پیشوا، دانشگاه آزاد اسلامی، ورامین، ایران*

الهه صادقی مدیسه - *دانشکده شیمی دارویی، علوم پزشکی تهران، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران*

خلاصه مقاله:
در این تحقیق با استفاده از روش های محاسبات مکانیک کوانتومی تئوری تابع دانسیته الکترون (DFT)، در سطح نظری B۳LYP و سری پایه *۶-۳۱ G) به منظور تعیین خصوصیات ساختاری، پایداری و میزان واکنش پذیری داروی S- لورازپام انجام شد. تحلیل NBO(Natural Bond Orbital analysis) برای محاسبه اثرات انتقالات الکترونی ناشی از برهمکنش های استریوالکترونی و همچنین برهمکنش های دوقطبی - دوقطبی و سایر خواص الکترونی S- لورازپام بکار برده شد. نقش انتقالات الکترونی، جمعیت های اوربیتالی، انرژی اوربیتال های دهنده و پذیرنده الکترون (donor-acceptor)، ممان های دوقطبی، پارامترهای ساختاری، اندیس های واکنش پذیری، انرژی اوربیتال های مولکولی و گپ انرژی Lumo -Homo، نمودار دانسیته سطح و دانسیته بار اتمی مولیکن برای داروی S- لورازپام مورد بررسی و مطالعه قرار گرفت. نتایج حاصل از محاسبات نظری در سطح G (B۳LYP/* ۶-۳۱) نشان داد گپ انرژی در داروی S- لورازپام (Eg = ۴/۸۰۹۵۰۴ الکترون ولت) است. تعیین اندیس های واکنش پذیری داروی S- لورازپام، نشان دهنده میزان الکترون خواهی و سختی بالا (پایداری) و واکنش پذیری کم این ترکیب است.

کلمات کلیدی:
تئوری تابع دانسیته الکترون، بهینه سازی، داروی لورازپام، توابع ترمودینامیکی، اوربیتال پیوندی طبیعی، اوربیتال های مولکولی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1197836