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

## عنوان مقاله:
مطالعات برروی میزان مشارکت پذیری اوربیتال P درداروی دکستروآمفتامین متصل به نانوساختار فولرن

## محل انتشار:
اولین همایش نانومواد و نانوتکنولوژی (سال: 1390)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

## نویسندگان:
شقایق بهروزی - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهر ری گروه شیمی*

رویا احمدی

## خلاصه مقاله:
دراین پژوهش ابتدا داروی دکستروآمفتامین روی نانوحامل فولرن قرارگرفت سپس ترکیبات (R=C60-Dexteroamphetamin-C63 -X)(X=Br,Cl,F) بهینه سازی شد و محاسبات اوربیتال پیوندی با روش NBO انجام شد تمامی محاسباتی با روش هارتری فاک در سری پایه G 6-31 با استفاده از نرم افزارهای گوس ویو و گوسین 98 درفاز گازی صورت گرفته است نتایج بدست آمده نشان دادکه هرچه هالوژن الکترونگاتیو تر باشد سهم اوربیتال P پیوند کاهش می یابد و سهم مشارکت اوربیتال P از روند Cl>R -FR-Br>R- پیروی می کند.

## کلمات کلیدی:
فولرن، سهم اوربیتال P و NBO

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/143261