

عنوان مقاله:

بررسی تانسورهای حفاظت شیمیایی NMR در مشتقات هالوژنی نانو حاملهای فولرنی متیل دوپا

محل انتشار:

اولین همایش نانومواد و نانوتکنولوژی (سال: 1390)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

رویا احمدی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهر ری گروه شیمی

لاله اله کرم

خلاصه مقاله:

در این پژوهش ابتدا داروی متیل دوپا بر روی نانو ساختار فولرن قرار گرفت سپس ترکیبات حاصله $X=F, Cl, Br$ (C60-) methylidopa-C64X بهینه شده است اتصال از طریق اتم کربن به فورم مثلثی گزارش شده در تحقیقات تجربی بوسیله نرم افزار گوس ویو شبیه سازی شده است سپس محاسبات NMR بر روی آنها انجام شد نتایج بدست آمده نشان داد روند بزرگی مقادیر این تانسورهای قطری درهمه ی کربن های مورد بررسی عبارت است از $\sigma_{11} > \sigma_{22} > \sigma_{33}$ در حالیکه مقدار σ_{aniso} نسبت به هم بستگی به مکانی که کربن ها در آن قرار گرفته اند دارد.

کلمات کلیدی:

متیل دوپا، فاز گازی، زاویه پیوند

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/143382>

