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

عنوان مقاله:
مطالعه محاسباتی برهمکنش داروی سیس پلاتین با فولرن B۲۴N۲۴

محل انتشار:
دهمین کنفرانس بین المللی علوم و توسعه فناوری نانو (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسنده:
افسانه نجفی - *گروه فارماکولوژی، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران*

خلاصه مقاله:
در این مطالعه ی محاسباتی، از تئوری تابع چگالی و نرم افزار گوسین ۱۶ استفاده شد تا فرآیند جذب کمپلکس سیس پلاتین توسط نانو ساختار بورنیترید (۲۴N۲۴B) بررسی شود. بنابراین ابتدا همه ساختارها با روشM۰۶-۲X و با دو مجموعهی پایه متفاوت Def۲tzvp و همچنین ۶-LanL۲DZ/ ۳۱g(d) (مجموعه ی پایه LanL۲DZ برای اتم پلاتین) بهینه شدند. سپس میزان خطای برهم نهی برای کمپلکس سیس پلاتین جذب شده بر روی نانوساختار بورنیترید اندازهگیری شد و کلیه انرژی های الکترونی اصلاح گردید. نتایج نشان می دهد که فرآیند اتصال کلر سیس پلاتین به اتم بور نانوساختار بورنیترید گرمازاست و همچنین نوع جذب فیزیکی می باشد. در هر دو سطح محاسباتی، انرژی جذب فرآیند کمتر از ۱-۱۰ kcal.mol است.

کلمات کلیدی:
سیس پلاتین، فولرن، برهمکنش شیمیایی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1701152