

عنوان مقاله:

بررسی جذب فیزیکی و شیمیایی مواد مخدر دی متیلتریپتامین و گامابوتیرولاکتون بر روی فولرن B24C24 به روش DFT

محل انتشار:

دومین کنفرانس بین المللی علوم و مهندسی (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

فاطمه شمسی - دپارتمان شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکز ایران

مرجانه صمدی زاده - دپارتمان شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکز ایران

خلاصه مقاله:

شیمی محاسباتی زیر شاخه ای از علم شیمی است که با استفاده از روش های ریاضی و قوانین فیزیک در آمیخته اند، تا به حل مسائل شیمی توسط رایانه ها بپردازد. نرم افزار های کاربردی در این علم Gaussian و Gauss view و Chem office و غیره می باشند. در طی سال های اخیر با توجه به کشف ساختارهای نانوتیوپ و فولرن و همچنین کاربردهایشان در زمینه های گوناگون از نوعی ساختار فولرن مانند کربن بور 24C24B به عنوان جاذب با روش محاسباتی 6 / 311G (d,p)-M062X به بررسی نظری جذب فیزیکی و شیمیایی برخی مواد مخدر از قبیل گامابوتیرولاکتون و دی متیل تریپتامین طبق نظریه DFT پرداخته شد. هدف کلی بررسی ساختار الکترونی و خواص شیمیایی ساختار 24C24B در حضور مواد مخدر ذکر شده می باشد.

کلمات کلیدی:

جذب، فولرن 24C24B، مواد مخدر، DFT

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/490638>

