

عنوان مقاله:

مطالعه نظری ساختار مولکولی داروی کلوپیدوگرل در فاز گازی و محلول

محل انتشار:

سومین همایش ملی تکنولوژی های نوین در شیمی، پتروشیمی و نانو ایران (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

سید احمد حسینی - دانشجوی کارشناسی ارشد علوم و فناوری نانو نانوشیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته کرمان، دانشکده علوم و فناوری های نوین

فهیمة شجاعی - عضو هیات علمی استادیار، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته کرمان، پژوهشکده فوتونیک

داریوش افصلی - عضو هیات علمی دانشیار، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته کرمان، پژوهشکده علوم محیطی

خلاصه مقاله:

محاسبات شیمی کوانتومی داروی کلوپیدوگرل در دو فاز گازی و محلول، بر اساس نظریه تابعی چگالی DFT مطالعه شده است. محاسبات و شبیه سازی کوانتومی با استفاده از روش های M062XB3LYP و مجموعه پایه G(d,p++6311) در هر دو فاز انجام شد. نتایج شبیه سازی نشان می دهد که شدیدترین باند در طیف فاز گازی بزرگتر از فاز محلول است و همچنین بین گاف انرژی و چگالی حالت ها رابطه وجود دارد

کلمات کلیدی:

داروی کلوپیدوگرل، نظریه تابعی چگالی، طیف ارتعاشی، خواص ترمودینامیکی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/491051>

