

عنوان مقاله:

مقایسه تجربی و محاسباتی لیگاند

محل انتشار:

همایش ملی یافته های نوین شیمی در صنعت پزشکی (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

خدیجه کلاته - دکتری شیمی معدنی، استادیار

رویا نیکمرام - دکتری، شیمی فیزیک، استادیار

فاضله خزائی - کارشناس ارشد، شیمی معدنی

خلاصه مقاله:

لیگاند یک مولکول کوچک آلی است که بیشتر در تحقیقات بیوتکنولوژی و بیوشیمی و در داروها مورد مصرف دارد. به منظور گسترش دامنه تحقیقات، به مطالعه و مقایسه تجربی و محاسباتی این لیگاند پرداخته ایم. طیف های، C-NMR، H-NMR، IR، UV جهت تایید ساختار گرفته شد و محاسبات Abinitio با متد B3LYP و B3P86 و سری پایه 31G-6 در نرم افزار گوسین 98 برای بهینه سازی ساختارهای فضایی و حاسبه انرژی و محاسبه سایر پارامترهای ملکولی لیگاند استفاده شده است. همچنین طول پیوند و زوایای پیوندی لیگاند مورد مطالعه قرار گرفت.

کلمات کلیدی:

azo - 4'-Hydroxy azo benzen-2-carboxylic acidi - 2-(4-Hydroxy phenyl azo)Benzoic acid

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/70977>

