

عنوان مقاله:

مطالعه خواص شیمی فیزیکی داروی ضد سرطان فولیک اسید (FolicAcid)

محل انتشار:

ششمین کنفرانس بین المللی یافته های نوین علوم و تکنولوژی با محوریت علم در خدمت توسعه (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

اشرف السادات قاسمی - هیئت‌علمی دانشگاه پیام نور-تهران-ایران

فرشته رضایی - دانشجوی کارشناسی ارشد دانشگاه پیام نور-تهران-ایران

خلاصه مقاله:

بررسی ویژگیهای شیمی فیزیکی، داروی ضد سرطان فولیک اسید در حالت پایه و برانگیخته در فاز گازی، آبی و در حلال متانول در سطح تئوری (B3LYP /6-311G(d, p) به منظور یافتن ساختار پایدار بررسی شد. به منظور بررسی ماهیت برهمکنش چگالی بار الکترونی بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) و پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (LUMO) محاسبه شدند. نتیجه حاصل از محاسبات نشان داد که پایداری داروی فولیک اسید در حالت پایه در فاز آبی از فاز گازی و متانول بیشتر است.

کلمات کلیدی:

فولیک اسید، ویژگیهای شیمی فیزیکی، HOMO، LUMO

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/920264>

