



چهارمین همایش شیمی، مهندسی شیمی و نانو ایران، دانشگاه تهران

اثر حلال بر پتانسیل الکترودی برخی داروهای بر پایه کینونها به روش CPCM

^۱محمد حسین فکری، ^۲مریم درویش پور، ^۳عبدالمحمد عطاران، ^۴فریبا اسکندری

^۱گروه شیمی، دانشگاه آیت الله العظمی بروجردی (ره)، بروجرد، ایران: m.h.fekri@abru.ac.ir

^۲گروه شیمی، دانشگاه آیت الله العظمی بروجردی (ره)، بروجرد، ایران: ma.darvishpour@gmail.com

^۳گروه شیمی، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

^۴گروه شیمی، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

چکیده

در روشهای الکتروشیمیایی تجزیه از کاربرد الکتروشیمی در حل مسائل مختلف تجزیه شیمیایی، از جمله تعیین مقدار مواد معدنی و ارگانیک استفاده می کنیم. امروزه به کمک روشها و دستگاههای جدید توانسته اند به تعیین مواد در حد نانوگرم برسند. استفاده از روشهای محاسباتی می تواند جایگزین روشهای تجربی در بدست آوردن پتانسیل های اکسید احیای کمپلکسها شود که خود موجب صرفه جویی در زمان و هزینه می شود.

در این پژوهش در نظر است که بهترین روش مطالعه تئوریک خواص ساختاری و الکتروشیمیایی برخی داروهای برپایه کینون ها ارائه شود و نتایج آن با داده های تجربی مقایسه گردد. هدف ما در این آزمایش بررسی پتانسیلهای نیمه موج احیای برخی داروهای برپایه کینون ها با استفاده از نرم افزار گوسین در حلال های مختلف می باشد. در اینجا با استفاده از متد HF و تقریب سری پایه 6-311+G کینون ها را در فاز گازی بدون هیچ گونه محدودیت تقارنی بهینه می کنیم. سپس فایل بهینه شده هر گونه را به صورت جدا در حلال DMSO و با روش CPCM به اجرا می گذاریم و انرژی آزاد گیبس آنها را بدست می آوریم. با استفاده از روابط موجود، پتانسیل نیمه موج را بدست آورده و با نتایج تجربی مقایسه می کنیم.

کلمات کلیدی

آنتی اکسیدان- کینون- پتانسیل الکترودی

The effect of solvent on the electrode potential quinone some drugs based on computational method CPCM

M. H. Fekri, M. Darvishpour

Ayatollah al ozma Boroujerdy University, Boroujerd, Iran

m.h.fekri @abru.ac.ir

ABSTRACT

we use Electrochemistry, electrochemical analysis methods used in solving various problems of chemical analysis, including determining the amount of mineral and organic materials. Today, little new methods and devices have been able to determine the extent of their ng. Polarography Electrochemical analysis method in which the potential severity of the graph is plotted against the Micro electrolysis solution. In this study, the revival of some drugs on the basis of Kenan with a computational method, we also studied the potential of them restoring. It does not have to calculate the potential wave ($E_1 / 2$) compounds, to compare its antioxidant properties in different above described solvents. Half-wave potential free energy calculation method is based on data obtained from theoretical calculations gypsum in the presence and absence of solvents and solvent for oxide regenerative modes are all studied species. The results are compared with the results obtained from is confirmed and empirical methods.