



شیمی و مهندسی شیمی

تهران - بهمن ۱۳۹۷

مطالعه نظری انتقالات پروتونی ۲ و ۳-دی آمینوپیریدین با ۳-نیترو بنزوئیک اسید بر اساس تئوری تابعی چگال

جیران عرب^۱، ابوالقاسم شاملی^{۲*}

۱- کارشناسی ارشد شیمی دارویی، دانشگاه آزاد واحد علوم پزشکی تهران، دانشکده شیمی دارویی، گروه شیمی دارویی

۲- استادیار شیمی آلی، دانشگاه آزاد واحد امیدیه، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

خلاصه:

ترکیب های انتقال پروتون در اثر انتقال یک یا چند پروتون بین دو گروه دهنده و پذیرنده وجود می آیند، که در ادامه می توانند به عنوان لیگاند با هسته های فلزی، کمپلکس ها را تشکیل دهند. در این پژوهش انتقال پروتون از واکنش ۲ و ۳-دی آمینو پیریدین، ۳-نیترو بنزوئیک اسید برای انجام محاسبه های نظریه ی تابعی چگال در سطح B3LYP/6311+G(d, p) انتخاب شد. محاسبه های بهینه سازی، فرکانس، انتقال های الکترونی در طیف سنجی مرئی - فرابنفش، انرژی اوربیتال های مرزی و NBO برای لیگاند ۲ و ۳-دی آمینو پیریدین-۳-نیترو بنزوئیک اسید به کمک نرم افزار NWChem انجام شد. مقایسه پیک های ارتعاشی لیگاند انتقال پروتون تهیه شده و گونه های دهنده و پذیرنده پروتون، تشکیل پیوند هیدروژنی بین مولکولی در لیگاند را نشان می دهد. پیک های محاسبه ای طیف سنجی مرئی - فرابنفش این لیگاند مربوط به انتقال های ILCT در هر دو گونه ی دهنده و پذیرنده با ویژگی $\pi^* \rightarrow \pi(p)/n$ می باشند. پیوندهای هیدروژنی O-H...N و N-H...O باعث پایداری ترکیب انتقال پروتون ذکر شده به مقدار 1-kcal/mol -393/30 می شوند.

کلمات کلیدی: نظریه ی تابعی چگال، انتقال پروتون، ۲ و ۳-دی آمینو پیریدین، ۳-نیترو بنزوئیک اسید.

۱. مقدمه

برهم کنشهای بین مولکولی و به ویژه پیوندهای هیدروژنی^۲ در تنوع فرآیندهای شیمیایی و بیولوژیکی نقش اساسی دارند. این پیوندها ضعیفتر از پیوندهای یونی و کووالانسی اما قویتر از پیوندهای واندروالسی هستند. اگرچه آنها با افزایش دما براحتی شکسته می شوند، اما نقش بسیار مهمی در طبیعت ایفا می کنند. بسیاری از ماکرومولکولها مثل DNA، پروتئینها یا سلولز و... کنفورمهای پایداری در غیاب پیوند هیدروژنی ندارند. گذشته از این، شکل ساختاری پروتئینها به طور مستقیم در عملکرد آنها نقش دارد و پیوندهای هیدروژنی مهمترین عامل در شکل دادن به ساختمان پروتئینها هستند. پیوند هیدروژنی به دلیل وجود گروههای الکترونگاتیو در سیستمهای زیست مولکولی نظیر اسیدهای آمینه و بازهای

¹ Email: shameli678@gmail.com

² -Hydrogen bonding