العلم سلطان علوم مايه به مثابه علوم كاربردي المعرفين المحلق المحلق خلاصه مقالات ت و جهار مین کترانس شیمی فنریک ایران (انجمن شیمی ایران) دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ماه ۱۴۰۳ A A A A 10000 HUUUUUUU *** لراج و تكركر: تسرين علدي









بیست و چهارمین کنفرانس شیمیفیزیک ایران

دانشگاه اصفهان

۲۹ و ۳۰ آبان ماه ۱۴۰۳







شیمی فیزیک پیشگان گرامی؛ دانشمندان، پژوهشگران و دانشجویان عزیز؛ به شهر و دانشگاه زیبای اصفهان خوش آمدید. مایه خورسندی است که هیئت مدیره انجمن شیمی ایران و کارگروه شاخه شیمی فیزیک این انجمن، بار دیگر به دانشگاه اصفهان و اعضای هیأت علمی گروه شیمی فیزیک آن اعتماد کردند و برگزاری همایش شیمی فیزیک در سال ۱۴۰۳ را به ما سپردند و از این رهگذر، فرصت خدمتگزاری و پذیرایی از شما بزرگواران را نصیب ما کردند. اینجانب از طرف کارگروههای اجرایی و علمی، و نیز از طرف همکاران، همیاران علمی و دانشجویان دانشکده شیمی و مدیریت دانشگاه اصفهان از تمامی شما بزرگان و سروران شرکت کننده گرامی تشکر می کنم که دعوت ما را مشتاقانه پذیرفتید و با ارسال و ارائه مقالات ارزشمند خود و با تشریف فرمایی خود، این همایش ملی را رویدادی آموزنده، پربار، لذت بخش و به یادماندنی کردید.

در یک دستگاه کامل آموزشی-پژوهشی، همایشها فرصتهایی را فراهم میآورند تا دانش پیشگان در فضایی آرام و با فراغ خاطر، از تلاشها، اندیشهها و یافتههای آموزشی و پژوهشی یکدیگر آگاه شوند و با عرضه و دادوستد آموختهها، آزمودههای و اندیشههای ارزشمند خود، مسیر آموزشی و پژوهشی آینده خود را بازنگری و بازتعریف کنند و به فعالیتهای پژوهشی خود فزونی، عمق و تندی بخشند. کشف تواناییهای متقابل دانشگاه و صنعت و بناگذاری همکاریهای پژوهشی کاربردی و صنعتی بین این دو نهاد گرانسنگ جامعه و همچنین شکوفایی اندیشههای نو در حل مشکلات و رفع نیازهای جامعه که پیشنیاز و نیروی راننده برای راهاندازی شرکتهای دانشبنیان است، از نوبرهای همایشهای دانشمدار است. دیدار چهرههای نورانی یکدیگر در این همایشها، بویژه آشنایی با همکاران و پژوهشگران جوان و دانشجویان پُرکار، شاداب و پُرامید که آیندهای درخشان و پربار برای دانش شیمیفیزیک را نوید میدهند و نور چشمان ما هستند، خود به تنهایی جانافزا و بهرهای کامل برای این همایش

در این ایام اندوهبار و در این میدان رادآزما، شاهدیم که چندباره مردان و زنان بزرگی از تبار پارسایان نیکوسرشت و از رشته گرانبهاگوهرهای درخشان و سروقامتان سرسبز و زندهدل، استوار بر پیمان خویش، پس از تلاشها و کوششهای بی دریغ خود برای آبادانی این جهان، با نثار جان شیرین خود در زیباترین دادوستد عاشقانه، آن را به ما وامیگذارند و در برابر دیدگان ما خرامان میگذرند و با خوشآمد و شادباش فرشتگان با نورهای تابان به مینوی برین وارد می شوند و نزد جانان و دلدار خود آرام میگیرند و غبطه ما واماندگان را برمیانگیزند. هم آنان که در سایه طوبی و بر کرانه چشمه زلال حیات، با جامهایی از می ناب و گوارا پذیرایی می شوند و بانگ نوشانوش سر می دهند و در آخرین کلام، سپاس خداوندگار جهانیان می گزارند. جهان آفرینا تو را سپاس که اینان را چراغ راه و ستاره آسمان اندیشه ما قرار دادهای و در شاهراه ولایت، راهبری فرزانه بر ما گماشته ای و دروازه باغ شهادت را بر ما باز گذاشتهای تا در تو رسیم و در میان بندگان پاک و بر گزیدهات در تو آویزیم. در این غمگساری، ما همچون باغ شهادت را بر ما باز گذاشته ای تا در تو رسیم و در میان بندگان پاک و بر گزیدهات در تو آویزیم. در این غم گساری، ما همچون باغ شهادت را بر ما باز گذاشته ی تا در تو رسیم و در میان بندگان پاک و بر گزیدهات در تو آویزیم. در این غم گساری، ما همچون سپاس که اینان را جراغ راه و ستاره آسمان اندیشه ما قرار داده ی و بر گزیدهات در تو آویزیم. در این غم گساری، ما همچون سپاس که اینان را بر ما باز گذاشته ای تا در تو رسیم و در میان بندگان پاک و بر گزیدهات در تو آویزیم. در این غم گساری، ما همچون باغ می فیزیک پیشگان ایران، بر کار گزاری و کار گماشت خود آگاهتر و استوارتر می شویم تا در دانش جویاتر، پویاتر و یابندهتر باشیم و از تو می خواهیم در بهره گیری از دانش، آرزومندتر، امیدوارتر، کوشاتر و تواناتر شویم. ما را یاری کن ایرانی آباد و سربلند باشیم و از تو می خواهیم در بهره گیری از دانش، آرزومندتر، امیدوارتر، کوشاتر و تواناتر شویم. ما را یاری کن ایرانی آباد و سربلند خود را دوچندان کردهاند، بی گزند و برای فرندان مان جاوید بماند و از ما دلشاد باشد.

قطرهای دانش که بخشیدی ز پیش متصل گردان به دریاهای خویش قطرهای علم است اندر جان من وارهانش از هوا وز خاک تن (مثنوی معنوی مولوی) پیش از آن، کین خاکها خسفش کنند پیش از آن، کین بادها نشفش کنند

حسن سبزیان (دبیر اجرایی همایش)، اصفهان زیبا، دانشگاه اصفهان، سهشنبه ۲۹ آبانماه ۱۴۰۳



فهرست محورها و زمینههای کنفرانس

تعداد مقالات	عنوان
۲.	الکتروشیمی، سل خورشیدی و باتری
۳۱	ترموديناميك شيميايي
14	زیستشیمی فیزیک و طراحی دارو
۱۵	سینتیک، دینامیک شیمیایی و کاتالیست
٣٠	شبیهسازی دینامیک مولکولی
14	شیمی سطح و حالتجامد
١	شیمیفیزیک بسپارها
۵۳	شیمی کوانتومی و طیفسنجی
11	نانو شیمیفیزیک

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
١	سخنرانیهای عمومی
٩	سخنرانیهای تخصصی
٧۴	پوسترها
584	نمایه نویسندگان



کمیته علمی:

دكتر اكبر اميدوار	دكتر محسن افتاده
دكتر عليرضا برنجى	دکتر رضا امیدیان
دکتر رضوان رحیمی	دکتر عادل رئیسی
دکتر حسن سبزیان	دکتر امیرعباس رفعتی
دكتر سودابه سيفي	دکتر نسرین سهرابی
دكتر عليرضا صلابت	دكتر حميدرضا شاملويي
دكتر الهه غريب شاهيان	دکتر سعید عزیزیان
دكتر حسين فرخ پور	دكتر فاطمه سادات فاطمىنسب
دکتر رضا کریمی شرودانی	دکتر ناهید فرضی
دکتر محمد حسین کوثری	دکتر عزت کشاورزی
دكتر فخرى السادات محمدى	دكتر عفت كيانپور
دکتر حسین محمدیمنش	دكتر فريبا سادات محمديان ثابت
دکتر مجید موسوی	دكتر نيازمحمد محمودي
دكتر محمدرضا نوربالا	دكتر فهيمه مهرانفر
دكتر حسين نيكوفرد	دكتر راضيه سادات نىبند
	دكتر مرتضى واحدپور





داوران مقالات

داوران دانشگاه	دانشگاه
محسن افتاده انشگاه پیامنور	انشگاه پیامنور
اکبر امیدوار	نشگاه اصفهان
رضا امیدیان دانشگاه اصفهان	نشگاه اصفهان
عليرضا برنجى مجتمع آموزش عالى گنابا	آموزش عالى گناباد
عادل رئیسی دانشگاه کاشان	انشگاه کاشان
رضوان رحیمی دانشگاه اراک	دانشگاه اراک
امیرعباس رفعتی دانشگاه بوعلیسینا	شگاه بوعلیسینا
حسن سبزیان حسن سنزیان	نشگاه اصفهان
نسرین سهرابی دانشگاه پیامنور	انشگاه پیامنور
حميدرضا شاملويى حميدرضا شاملويى	نشگاه لرستان
عليرضا صلابت دانشگاه اراک	دانشگاه اراک
سعید عزیزیان دانشگاه بوعلیسینا	شگاه بوعلیسینا
فاطمه سادات فاطمینسب دانشگاه مازندران	شگاه مازندران
حسين فرخ پور دانشگاه صنعتى اصفهان	فاه صنعتی اصفهان
ناهید فرضی دانشگاه اصفهان	نشگاه اصفهان
عزت کشاورزی دانشگاه صنعتی اصفهان	فاه صنعتی اصفهان
رضا کریمی شرودانی دانشگاه اصفهان	نشگاه اصفهان
محمد حسین کوثری ۔	لات تکمیلی علومپایه زنجان
فخرى السادات محمدى دانشگاه تحصيلات تكميلي علوم پ	لات تکمیلی علومپایه زنجان
فريبا سادات محمديان ثابت وانشگاه تهران	انشگاه تهران
حسین محمدیمنش دانشگاه یزد	دانشگاه یزد
نیازمحمد محمودی پژوهشگاه رنگ	ژوهشگاه رنگ
مجید موسوی دانشگاه اصفهان	نشگاه اصفهان
فهيمه مهرانفر شركت آب و فاضلاب استان	و فاضلاب استان تهران
محمدرضا نوربالا دانشگاه يزد	دانشگاه یزد
حسين نيكوفرد ــــــــــــــــــــــــــــــــــــ	فاه صنعتى شاهرود
مرتضى واحدپور دانشگاه زنجان	انشگاه زنجان





سخنرانيهاي عمومي

صفحه	عنوان	سخنران	شماره
۲	ً نقش الکتروشیمی در دنیای مدرن امروزی : چشمانداز و چالشها	میرقاسم حسینی	١
۵	پدیده ترشوندگی: اصول و کاربردها	سعيد عزيزيان	٢
۷	شیمی محاسباتی کوانتمی سامانههای با مقیاس بزرگ	حسين فرخ پور	٣



شماره	سخنران	عنوان	صفحه
١	زهرا استادشريف معمار	پیشبینی چگالی فاز توده با استفاده از پروفایلهای چگالی جرمی نانوقطرات مایع یونی دوکاتیونی با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی از اساس	۱.
۲	سید محمد اعظمی	ارزیابی بار و انرژی ذخیره شده در نانوخازنهای مولکولی	۱۳
٣	حنانه السادات اقتدارى	مطالعه نظری مکانیسم جذب آلاینده گاز دی اکسید کربن توسط مدل آنزیمی <i>ک</i> ربنیک آنهیدراز انسانی	18
۴	محمدرضا افيونى	بررسی هامیلتونی موثر الکترونی در شبکهی بایفنیلن	۱۹
۵	امیر حسین جلیلی	رفتار حلالیت متان تیول و هیدروژن سولفید در مایعهای یونی خانواده ایمیدازولیوم: بررسی مقایسهای از دیدگاه تجربی و شبیهسازی دینامیک مولکولی	٢٣
۶	زهرا جمشيدى	دینامیک کاواک پلاسمونی بر پایه هامیلتونین خطی وایبرونیک	28
۷	زهرا چاوشپور نطنزی	بررسی پایداری حرارتی آنزیم سیتوکروم سی انکپسوله شده در شبکه فلز- آلیIR-MOF-74-VI از طریق شبیهسازی دینامیک مولکولی	۲۷

انی شمی فنریک ایران دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

**

صفحه	عنوان	سخنران	شماره
29	بررسی جفت شدگی ناآدیاباتیکی در سطوح انرژی پتانسیل اکسیژن دی فلورید	مریم دهستانی	٨
۳۲	شبیهسازی DFT بر روی عملکرد نانوصفحه BC2N برای تشخیص As3+ در فاضلاب شهری و صنعتی	رضوان رحیمی	٩
۳۵	بررسی نقش کاتیون عاملدار شده در برهمکنش کارواکرول با مایعات یونی آمینواسیدی به کمک شبیهسازی دینامیک مولکولی	زهرا رضاپور	١.
۳۸	محاسبات تحلیلی احتمال عبور با استفاده از مدل پتانسیل مستطیلی	مريم السادات رفيعي	11
۴۱	بررسی محاسباتی مکانیسم نفوذ داروی ایرینوتکان در چارچوب آلی کوولانسی بر پایه پورفیرین	محسن سروش منش	١٢
44	چشم انداز ساختاری برهمکنش قند-پپتید و اثر آن در انتخاب ساختارجهت بازتولید طیف تجربی	محمد صالحی اردلی	١٣
41	بررسی سینتیکی واکنش پیروگالول با سدیم یدات به روش تجربی و محاسبهی تغییرات تابع گیبس واکنش با روشهای نظری	مهدى طالبيان	١۴
۵۰	آیا امکان داشتن تغییر فاز در سیستمهای شبه یک بعدی وجود دارد؟	مهدی ظریف	۱۵
۵۴	تجزیه و تحلیل توزیع حفره⊣لکترون برای اثر انتقال بار در کاتالیزور نوری کمپلکس آلی-فلزی نیکل	سارا فخرایی	18
۵۷	ساخت سل خورشیدی آلی بر پایه ترکیب ITIC:PCE10 و بررسی پایداری دمایی و نوری آن	شاهین قاس _م زاده	١٧
۶.	مطالعه دینامیک کوانتومی جفت شدگی قوی تحت میدان کاواک پلاسمونی	کیمیا کارگر	١٨
۶۳	برخورد C2 با H2 و همتاهای ایزوتوپی آنها در فضای بین ستارهای	زينب كركني	١٩
88	شبیه سازی مولکولی فرآیند انحلال سلولز در مایع یونی ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم استات و مقایسه آن با محیط آبی	محمد حسین کوثری	۲.
۶٩	ارائه مدل دانه درشت تترامر کیتوزان بر اساس میدان نیروی مارتینی	بشری مرادی	۲ ۱
۲۱	بررسی اثر دما و طول زنجیرآلکیلی کاتیون بر رفتار تعادل فاز مایع- مایع سیستمهای سهتایی آبی پلیپروپیلنگلیکول – نمک تتراآلکیلآمونیوم هالید	نهال نصرتپور	77



جهارمین کنفرانس شیمی فنربک ایران

دانشگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

**

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
۷۵	۔ بررسی نظری برهمکنش داروی ۲-تیواوراسیل با نانومخروط بورنیترید	فاطمه آبگون	١
۷۷	ویژگیهای مکانیکی و دمای انتقال شیشهایشدن چارچوب فلز-آلی پرشده با رزین اپوکسی: یک مطالعهی دینامیک مولکولی	مائدہ ابراھیم نجف آبادی	٢
٨٢	جذب و جداسازی اتان-اتیلن و پروپان-پروپیلن توسط چارچوبهای فلز-آلی سری همخانواده ZUL با استفاده از روش شبیهسازی	فاطمه ابراهیم زاده چاری	٣
٨۴	مطالعهی توانایی میدانهای نیروی مبتنی بر OPLS در محاسبهی خواص ساختاری مایعاتیونی دوکاتیونی	زهرا استادشریف معمار	۴
۸۷	بررسی تاثیر کمپلکس شدن با یونهای فلزی بر اسیدیته پیرولوکینولین کینون	بهنوش اسلام پناه	۵
٩٠	بررسی اثرات یان - تلر در انحراف سیستم های مولکولی SeX2(X=F,Cl,Br,I)	علی اسماعیلی	۶
٩۶	کاربرد فتوراکتورهای سلول سوختی در فرآیندهای اکسیداسیون پیشرفته و تولید همزمان الکتریسیته	زکیه اسمعیلی	٧
٩٩	بررسی محاسباتی برهمکنش گاز SO ₂ با سطح بیس (ایمینوتیولیتو)رودیم	منصوره اصفهاني	٨
1.2	استخراج خواص ترمودینامیکی تعادلی و غیر تعادلی برای حالت گازی سیستم ZnH2 از روی سطح انرژی پتانسیل بین مولکولی سه بعدی کوانتومی	عاطفه اكبر پور	٩
1.0	ساخت توری استیل با سطح آب گریز با استفاده از کند و سوز لیزری با هدف جداسازی نفت از آب	فائزه اميدعلى	١.
۱۰۸	ساخت لایهنازک تلورید کادمیوم به روش لایه نشانی الکتروشیمیایی	فاطمه امیرسرداری درجز	11
)))	بررسی برهمکنش داروی کلرومتین با نانو متخلل کوکوربیت {۶}اوریل به روش محاسبات کوانتومی و نظریه تابع چگالی	اشکان باقری	١٢
114	مطالعه نظری اثرات مشارکتی و استخلاف بر خواص پیوندهای تترل و هیدروژنی در کمپلکس های سه جزئی X-Ph-CN:SiF4:HF	ستوده باقری	١٣
117	تاثیر تعداد حلقههای آروماتیک بر اثر مشارکتی بین برهمکنش¬های CH…π و N…πدر حلقه پیرازین	ستوده باقری	١۴

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آمان ۱۴۰۳

4

ی شمی فنریک ایران

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
17.	مطالعه نظری ساختار الکترونی و طیف الکترونی کمپلکس کوئوردیناسیونی [CoIII(Salophen)(NH3)2+	اکبر بختیاری	۱۵
١٣٣	کاربرد نانو ذرات مغناطیسی آهن (IONPs) در بیوتکنولوژی و بررسی سینتیک برهمکنش با بیومولکولها و انواع روشهای ساخت	هانیه برقی جهرمی	18
18	بررسی حلالیت داروی آلپرازولام در حلال یوتکتیک عمیق طبیعی کولین کلراید/اوره در مقایسه با آب	سمانه برومند	١٧
129	بررسی ساختار و روش تهیه متفاوت گرافن اکساید	امير بلوچ	١٨
١٣٢	بررسی قدرت مهار پروتئاز اصلی توسط برخی از مشتقات ابسلن: یک مطالعهی داکینگ مولکولی	هانيه بلوچ	١٩
182	برهمکنش مولکولی دیمر کیتوزان با اوره و آب با استفاده از نظریه تابعی چگالی	فاطمه سادات بنی جمالی	۲۰
184	بررسی ترمودینامیکی جذب سطحی مولکول اسید فولیک بر روی نانوحامل پپتیدی دی فنیل آلانین در درمان سرطان: مطالعات تئوری	مریم بهشتی مارنانی	21
14.	مطالعه خواص حجمی محلول دوجزیی غیر الکترولیت شامل اتیلن گلیکول مونو متیل اتر و ۱- هپتانول در دماهای مختلف	فاطمه پرويز	٢٢
147	جذب کروم (VI) با استفاده از جاذب چارچوب فلز آلی مبتنی بر زیرکونیوم	فرشاد میرزایی ولدی	۲۳
180	مطالعه الکتروشیمیایی ماده دارویی پاراستامول برروی الکترود های اصلاح شده با ساختار گرافنی	سعیدہ پورھادی نجف آبادی	74
148	مطالعه محاسباتی ساختار الکترونی داروی پاراستامول با استفاده از نظریه کوانتومی اتم در مولکول (QTAIM)	سعیدہ پورھادی نجف آبادی	۲۵
101	بررسی برهمکنش دیفن هیدرامین با آلبومین سرم خون انسانی با استفاده از مطالعات طیفسنجی و شبیه سازی دینامیک مولکولی	سحر پولادرگ	٢۶
154	مطالعه محاسباتی به دام اندازی گاز CO2 بر روی ساختارC68-گرافاین تزئین شده با فلز A1	زهرا تابنده	۲۷
184	طراحی و سنتز یک چارچوب آلی-کوالانسی مزدوج جدید بر پایه پریلن و کاربرد آن در تبدیل نور-گرمای انرژی خورشیدی و نمک زدایی از آب دریا	مر تضی ترابی	۲۸
180	ساخت کربن پارچه ای با سطوح ابرآبگریز⊣برآبدوست برای تبخیر خورشیدی در سطح مشترک	حانيه تهذيبى	۲۹

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آیان ۱۴۰۳

4

ی شمی فنریک ایران

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
188	مطالعه نظری جذب داروهای هیدروکسی اوره، مرکاپتوپورین و تیوگوانین توسط MOFهای مبتنی بر تیتانیوم به روش GCMC	سولماز تيمورزاده	٣٠
180	تهیه نانوکامپوزیت مکسین/ فلزات واسطه برای ابرخازنها: الکترودهای با کارایی بالا	مينا جانباز فوتمى	۳۱
188	استفاده از بیونانوکامپوزیت پلیمر/چارچوب فلزی-آلی به عنوان یک جاذب جدید برای جذب انتخابی آنتیاکسیدانهای طبیعی	اعظم جباری	٣٢
171	سینتیک رفتار جذب و واجذب سطحی یک رنگدانه طبیعی روی نانوکامپوزیت بیوپلیمری حاوی MOF و نانوذرات مغناطیسی	اعظم جباری	٣٣
۱۷۵	برر سی اثر اندازه حفرات کاتالیستهای میکرو و مزوپور تحت دما و زمانهای مختلف بر ایزومریزاسیون نرمال-هپتان	زينب جعفرى	٣۴
178	بررسی پایداری آنزیم لیپاز تثبیتشده بر روی غشای بسپاری اصلاحشده با نانوصفحههای	فرانک جعفریان	۳۵
۱۸۱	اثر میدان الکتریکی بر انتقال گرمای آب محدود شده بین دو صفحه نیترید بور	سارا جهان آبادی	۳۶
184	پایداری نوری و خواص فوتوفیزیکی سامانه ی آلی بر پایه کلکون	رومینا چگینی	۳۷
184	تاثیرتغییر نقص روی ظرفیت کوانتومی الکترود پایه سیلیسنی در عملکرد ابرخازن ها	زهرا حسن زاده	۳۸
19+	بررسی مقادیر ترمودینامیکی گلایسین در فاز محلول	زهرا حسن زاده	۳٩
۱۹۳	ابرخازن های هیبریدی با کارایی بالا بر پایه نانوساختارهای پوسته-هسته دوفلزی و نانو کره های کربنی	سید امیرعلی حسینی واعظ	۴۰
198	بررسی جفت شدگی مولکول-نانوذره با ارائه مدل برهمکنشی دوقطبی-دوقطبی	مریم السادات حسینی	۴۱
199	مطالعه برهم کنش سیکلودکسترینهای طبیعی با داروی کریزوتینیب به روش شبیهسازی دینامیک مولکولی	لیلا حکم آبادی	47
202	بررسی تشکیل کمپلکس درهم جای سیکلودکسترینهای اصلاح شده با داروی ارلوتینیب به روش داکینگ و شبیهسازی دینامیک مولکولی	لیلا حکم آبادی	۴۳
2.0	مطالعه Ab Initio كوپليمريزاسيون كرتونيك اسيد و آلفامتيل استايرن	فرحناز حمدی هولاسو	6 4

دانشگاه اصفهان ۲۹و ۳۰ آیان ۱۴۰۳

جهارمین کنفرا

*

انی شمی فنریک ایران

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
202	ارزیابی محاسباتی جذب گاز سمی سیانوژن برومید بر روی سطح نانوقفس های B12N12، B12N12 و B12N11P در حضور میدان الکترواستاتیک	مینا حیدری	۴۵
7+9	بررسی نظری برهمکنش دارو ۵-فلویورواوراسیل، B12P12 با آدنین نوکلیو باز TD-DFT ،DFT و AIM	مینا حیدری	48
TIT	بررسی نظری افزایش مایکل به عنوان واکنش کلیدی ترکیبات کالکون در حضور متان تیول	مونا خاکسفیدی	۴۷
510	بررسی بر هم کنشهای بین مولکولی هیستیدین و محلول های مائی مالتوز با استفاده از خواص حجمی و آکوستیکی	خاطره خانلرزاده	۴۸
TIA	مطالعه خواص الکتروشیمیایی الکتروکاتالیست های چهارچوب فلز-آلیCO و Ni-Co بر روی فوم نیکل و کاربرد آن به عنوان آند در پیل های سوختی اوره	میر قاسم حسینی	49
TTI	مطالعه جذب گاز نیتروژن اکسید برروی نانوصفحات خالص و تزریق شده تی گرافن	مهرشاد خورشیدی	۵۰
226	مدلسازی معادله حالت PC-SAFT برای سیستمهای تجمعی و غیرتجمعی	سپیدہ دلسوز هفشجانی	۵١
۲۲۷	تهیه، ارزیابی ویژگی های بیوفیزیکی و زیستی لیپوزوم کاتیونی مترونیدازول	رابعه خوشنويس زاده	۵۲
۲۳۰	مطالعه ساختار ملیتین و پپتید MDP1 با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی	يسرا دلشاد	۵۳
۲۳۳	مطالعه ی دینامیک مولکولی و مدل سازی برا ی جلوگیری از انباشتگی پروتئین تاو به کمک مهارکننده در بیماری آلزایمر	نسرين دلفان	۵۴
228	شناسایی اهداف جدید اسید آبسیزیک با استفاده از رویکردهای محاسباتی	زهرا ايرانمنش	۵۵
۲۳۸	مطالعه سطح انرژی پتانسیل بین مولکولی برای کربن دواتمی و گاز نئون	محمدمهدی دهشیری	۵۶
260	مطالعه محاسباتی خواص ساختاری و الکترونی نانوساختار ۸ – ۱۶ – ۴ گرافاین خالص و تزئین شده با فلزسدیم و بررسی جذب هیدروژن روی آن	مهتاب دهقانی	۵۷
۲۴۳	انتقال الکترون تک لایه های خودسازمان یافته عامل دار شده با فروسن کربوکسالدهید	الهه دهناری	۵۸
248	مطالعه مهارکننده های(پیم۳) کیناز به عنوان عامل ضد سرطان با استفاده از کیوسار سه بعدی	مار یه دهواری	۵۹
769	افزایش پایداری آنزیم لیزوزیم از طریق طراحی محاسباتی: یک رویکرد هم افزایی با ترکیب یادگیری عمیق و ترمودینامیک 	حميدرضا كلهر	۶.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آیان ۱۴۰۳

جهار میں کنھ

**

انس شمی فنریک ایران

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
222	مطالعه جذب و احیای گاز CO2 روی نانوقفس های Al5CuN6 و Al11CuN12	رحیم رحمن آبادی	81
200	مطالعه DFT خواص جذب ترکیبات آلی فرار توسط یک نانو صفحه B2N	رضوان رحيمي	87
201	تاثیر میدان الکتریکی بر رفتار فازی آب بین دو صفحه بور نیترید	حامد رزاقنيا	۶۳
780	بررسی نقش کاتیون عاملدار شده در برهمکنش کارواکرول با مایعات یونی آمینواسیدی به کمک شبیهسازی دینامیک مولکولی	زهرا رضاپور	54
798	بررسی نظری ساختار مولکولی آمفتامین و مت آمفتامین، و پتانسیل گرافن برای جذب آنها	لادن رضائيان	۶۵
799	تهیه حلال اتکتیک عمیق جدید مبتنی بر تیمول و بررسی خواص فیزیکوشیمیایی آن	سولماز رفعتى	<i>۶۶</i>
799	بررسی کاربرد حلال اتکتیک جدید مبتنی بر تیمول در استخراج متیلن بلو از محلول آبی	سولماز رفعتى	۶۷
222	شبیهسازی دینامیک مولکولی حلال اتکتیک عمیق غیر یونی مبتنی بر تیمول	سولماز رفعتى	۶۸
220	تزئین بوروفن با اتم اسکاندیوم برای ارتقای ظرفیت جذب هیدروژن در آن	سيما روشن	۶٩
227	سازوکار فرآیند آسایش غیرتابشی هسته مایکوسپورین ها به عنوان پایه ترکیبات موثر در مواد ضدآفتاب طبیعی	سیمین روشن	٧٠
271	بررسی نظری خواص فتوفیزیکی و انتقال پروتون در حالت برانگیخته در ۱ و ۴ -دی هیدروکسی آنتراکوئینون	اسماء ریگی	Y١
276	بررسی نظری تمایل اتصال دستهای از ترکیبات طبیعی پلی فنولی به پروتئاز اصلی کرونا ویروس	صفیه ریگی شایسته	۲۲
777	شناسایی و حذف گاز NO با استفاده از سطح h-BN آلاییدهشده با گوگرد	محمد رضا زمانی	۷۳
44.	مطالعه ترمودینامیکی مزوساختار TiO2/SBA-16-NH2 به عنوان سیستم دارورسانی	فاطمه ساکی	٧۴
292	اثر تغییر آنیون بر الکترولیت مایع یونی با کاتیون متقارن سولفونیوم در باتریهای لیتیم-یون	مرضیه سبزی سروستانی	۷۵
795	مطالعه جذب گاز گلخانه ای CF4 در نانولوله کربنی با روش شبیه سازی مونت کارلو	وحيد سخنوران	٧۶

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۲۰ آیان ۱۴۰۳

4

ی شمی فنریک ایران

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
799	مطالعه نظری گرمای جذب همپوششی (Qst) گازهای سیلان، مونوکسیدکربن و هیدروژن روی گرافیت	وحيد سخنوران	۷۷
۳۰۲	مطالعه ترمودینامیکی نانوذرات مغناطیسی Fe3O4/SBA-16-NH2 به عنوان سیستم دارورسانی	سمانه سلیمانی	¥٨
۳۰۵	پاسخ نوری غیرخطی نانوخوشه های تیتانیوم کاربید: یک مطالعه نظری	حديثه سليمانى	Y9
۳۰۷	مطالعه رفتار الکتروشیمیایی و ابرخازنی کمپلکس کاتوسن خودانباشته بر روی الکترود فیبر کربنی	زهرا سمیعی	٨٠
۳۱۰	تجزیه و تحلیل جبهه های خودکاتالیستی در هندسه شعاعی برای سامانه (IAA) یدات- اسید آرسنیوس	مریم سید شریفی	٨١
۳۱۳	اوزونولیز تیوفن: مطالعه محاسباتی سازوکار واکنش	مریم سیدشریفی	٨٢
818	برر سی pH و زمان واکنش بر عملکرد فوتوکاتالیستهای TiO2/502La@V و Sn@CaO/TiO2 در حذف مالاشیت گرین	فاطمه شبانی	٨٣
۳۱۹	بررسی جذب داروی های آزولی بر گرافن و گرافن اکسید از طریق محاسبات کوانتومی	خدیجه شکوهی	٨۴
۳۲۲	تهیه نانوکامپوزیت با درجه تخلخل متفاوت از زیستتوده بر پایه مس اکسید	سودابه سيفى	٨۵
373	ارتباط بین نرخ پرش و حفظ همسازی در کانالهای یونی	مینا سیفی	٨۶
***	بررسی حذف آلایندههای محلول آبکاری کروم سخت با استفاده از روش الکترودیالیز	یدالله شاد	٨٧
۳۳۱	مطالعه محاسباتی طیف رامان تقویت شده از سطح آمینوتولوئن در برهمکنش با سطح نقره و طلا	صهيب شاه محمدنژاد	٨٨
۳۳۴	بررسی جذب داروی فلودارابین بر نانو لوله ی کربنی تک جداره از طریق تئوری تابعی چگالی	خدیجه شکوهی	٨٩
۳۳۷	توسعه رابط کاربری پایتون با هدف استخراج هامیلتونین جفتشدگی ویبرونیک خطی	محمد شمس احمدسرائی	٩٠
360	مطالعه DFT جذب آمونيوم از محيط پساب توسط جاذب زئوليت كلينوپتيلوليت	مهناز شیخی	٩١

دانشگاه اصفهان ۲۹و ۳۰ مان ۱۴۰۳

4

ی فنرمک ایران

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
۳۴۳	یک مطالعهی شبیه سازی مولکولی برای تأثیر کلسترول بر تجمع فیبریلهای آمیلوئید بتا در غشاء سلولی	نفیسه صالحی نجفآبادی	٩٢
348	اعمال میدانهای الکتریکی برای جلوگیری از تجمع پپتیدهای آمیلوئیدبتا بر روی غشاء سلولی: یک شبیهسازی دینامیک مولکولی	نفیسه صالحی نجفآبادی	٩٣
349	بررسی نقش محافظتی مولکول [AC0107] در بیماری آلزایمر با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی	نفیسه صالحی نجفآبادی	٩۴
302	کاربرد شبیهسازی مکانیک کوانتومی نظریه تابع چگالی (DFT) در تعیین خواص فوتوکاتالیستهای فرآیند اکسیداسیون پیشرفته	مینا صدیقی	٩۵
۳۵۵	بررسی دوپایایی حاصل از انتقال بار درونمولکولی کمپلکس دوهستهای سیس-سیس NCSe)2Fe-bpym-Co(bpym)(NCSe)2]+1	کبری صلابت	٩۶
302	بررسی ترمودینامیکی تجمع مایع یونی ۱-هگزیل ۳-متیل ایمیدازولیوم برمید درمخلوط های حلالی آب و ۲-اتوکسی اتانول براساس اندازه گیری هدایت سنجی	جواد صمدی شال	٩٧
381	مطالعه کوانتومی بر روی موقعیت های اتمی متفاوت و تغییر خواص الکترونی ملکول پنتاسن	محمد حسين حورزاد	٩٨
362	مقایسه عامل دار کردن کووالانسی و غیر کووالانسی نانولوله¬های بورنیتریدی در برهمکنش با داروی داکسوروبیسین توسط مطالعه شبیه سازی دینامیک مولکولی	کبری فراهانی	ঀঀ
368	مطالعهی کوانتومی روی نانو حلقه ها به روش نظریهی تابع چگالی	مهرزاد مولوی	١٠٠
۳۷.	بررسی خواص شیمی فیزیکی گوشت شتردر دماهای مختلف با کاربرد مدل توسعه یافته فلوری-رنر	مریم عابدی	۱۰۱
۳۷۳	بررسی پارامترهای ترمودینامیکی محلول آبی NaCl-RbCl-LiCl با استفاده از مدل برهم کنش یونی پیتزر	مریم عابدی	1.7
488	استفاده از مدل توسعه یافته UNIQUAC برای بررسی تعادل فازی و پارامترهای برهم کنش در سیستم های آبی حاوی غیرالکترولیت	مریم عابدی	١٠٣
۳۷۹	سنتز، شناسایی و بررسی عملکرد نانوصفحه های RuCo-MOF تثبیت شده بر روی فوم نیکل برای الکترواکسیداسیون آلانین	ناصر عباس زاده	1.4

میت و جهار مین کنفرانس شیمی فنریک ایران ۱۴۰۳ میلی کنفرانس شیمی فنریک ایران دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
۳۸۱	تأثیر استخلاف BN بر خواص نوری غیرخطی نانوکاسهی C22H12	سلماز عبدالهى	١٠۵
		جونقانی	
۳۸۳	آنالیز بیوانفورماتیک داده های بیانی در بیماری مولتیپل اسکلروزیس	مهرسا عدالت	1.8
328	تعامل کمپلکس جدید ضدسرطان Pt (آمیل دیتیوکاربامات) با آلبومین سرم گاوی: مطالعه طیف سنجی و شبیه سازی مولکولی	زهرا عرب پورشیراز	١٠٧
377	اتصال مولکولی و مطالعات طیف سنجی اتصال کمپلکس های ضد سرطان پلاتین با البومین سرم گاوی	زهرا عرب پورشيراز	١٠٨
۳۹۰	مطالعه محاسباتی بر روی مشتقات فلاوونوئیدها به عنوان بازدارنده خوردگی فلزات	فاطمه اكتفا	١٠٩
۳۹۳	طراحی محاسباتی نیمرساناهای آلی جهت کاربرد در سلولهای خورشیدی آلی	فاطمه فاضلى	11.
398	مطالعه نظری اثر لیگاند محوری هیستیدین و مشتقات آن بر اتصال CO به هِم	فاطمەسادات)))
		فاطمىنسب	
۳۹۹	در برخی UV-Vis بررسی مکانیک کوانتومی انتقال های الکترونی طیف های	سارا فخرايي	117
	مشتقات دارویی پیریمیدوکینولین: مطالعه اوربیتال های انتقال طبیعی		
4.1	مطالعه واکنش پذیری و حساسیت HOP-گرافن نسبت به گاز کربن دی اکسید	سيف اله جليلي	۱۱۳
4+4	کاربرد تئوری تابع چگالی (DFT) برای بررسی ویژگی ریزساختاری سیستم های اتیلن گلیکول دی استات + ۱-الکل ها (C3-C8) از دیدگاه تجربی	معصومه فراهانی فروزی	114
4.1	برهمکنش های مولکولی بین ترکیب های گوگرددار مطلوب با مایعات یونی جهت	ژیلا فرج زاده	110
	گوگردزدایی درصنایع پالایش نفتی : مطالعه DFT		
414	بررسی تئوری-عملی افزایش برداشت نفت با روش تئوری تابعیت چگالی: استفاده از استامینوفن به عنوان دمولسیفایر	اسدالله فرهادی	118
FIV	محاسبه ی ویژگی های توپولوژیک با تابع ونیر برای نیمه هادی نیکل-بنزن هگزاتیول	نفيسه فلسفى	117
420	بررسی فعالیت بیولوژیکی یک مشتق پیریدو[d-۲،۳] پیریمیدین بر اساس محاسبات DFT و شبیه سازی داکینگ مولکولی	مهران فیضی-ده نایبی	118

XVIII

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ یان ۱۴۰۳

. شمی فنریک ایران

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
474	مطالعه ی تولید هیدروژن از تفکیک اتانول بر روی سطح کاتالیزگر Ni(۱۰۰) با استفاده از شبیه سازی مونت کارلوی سینتیکی	پروانه کبوتری	١١٩
477	بررسی تأثیرNa+ بر پایداری و احتمال تولید یوراسیل و توتومرهای آن با کمک زنجیره مارکوف	زينب كركنى	17.
420	بار گذاری داروی متوتر کسات بر بستر نانولوله ی بورنیتریدی اصلاح سطحی شده: مطالعه شبیه سازی دینامیک مولکولی	لیلا توحیدی فر	171
477	شبیهسازی دینامیک مولکولی حلالهای اوتکتیک عمیق سبز بر پایه کولین و مشتق های آن با اوره	فاطمه فتاحى	122
438	امکان استفاده ازCalix[4]pyrrol بعنوان اند باتری های یون لیتیم،سدیم وپتاسیم	الهام گراوندتبار	١٢٣
۴۳۸	مقایسه جذب لیتیوم و منیزیم بر روی اکسیدهای فلزی با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی	آمنه گنجی راد	174
441	مطالعه نظری سینتیک مکانیسم قطعه قطعه شدن دیپپتیدهای معین و ارائه نگرشی نو برای نقش نوع کاتیون فلزی در این مکانیسم	نازنین لقمانی	180
444	بررسی جذب گاز کربن دی اکسید بر روی هتروبایلایر GBS2 با استفاده از نظریه تابعی چگالی	شایان محمدزاده	178
449	امکان سنجی ذخیره سازی هیدروژن بر روی ساختار B12P12 تزیین شده با کلسیم : مطالعه نظری بر پایه DFT	ثمین محمدی قشلاق	177
449	بررسی سینتیک و ترمودینامیک جذب سطحی کاربامازپین بوسیله نانولوله چند جداره	نرگس باقری	١٢٨
409	بررسی ترکیبات هیدروکسی آنتروپی بالای فلزات واسطه به منظور کاربردهای تولید و ذخیره انرژی	نسیم محمدی باوریانی	١٢٩
494	عملکرد کاتالیزوری گرافاین تزیین شده با نیکل برای واکنش تولید هیدروژن	فاطمه متقى	۱۳۰
490	سنتز و مشخصه یابی نانوذرات مغناطیسی فریت کبالت-روی برای کاربرد در	محبوبه حقانى	١٣١
498	هایپرترمیای پزشکی مطالعه نظریه تابعی چگالی جذب سطحی کربن دی اکسید روی زئولیت M-ABW تبادل شده با کاتیون	روح الله کریمی	١٣٢

دانشگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

جارس

**

انی شمی فنربک ایران

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
471	اکسیداسیون کاتالیزوری آنتی بیوتیک سیپروفلوکساسین درحضور اکسنده پرسولفات بر روی اسپینل های فریت کبالت	مهشید محمودی	١٣٣
474	مطالعه نظری خواص فوتوفیزیکی کمپلکسهای (Pt(II بر اساس لیگاند بنزوکینولین (bzq) و کاربرد آنها درOLED	بتول مرادپور	186
477	مطالعه ساختار کمپلکس مس) 3،1) II-دی(۲-پیریدیل) پروپان-۳،۱-دی¬اُن با استفاده از نظریه تابعی دانسیته	آرزو مرادی	١٣۵
47.	تعیین علامت ضریب ژیرومغناطیس با استفاده از تشدید مغناطیسی هسته	سينا مرحبائي	188
484	امکانسنجی شناسایی برخی عناصر فلزی دانهٔ برنج با استفاده از طیفسنجی جرمی زمان پرواز-واجذب یونش لیزری	رؤیا مردانیان دهکردی	١٣٧
488	مطالعه نظری تاثیر استخلاف بر پایداری یک ساختار شش ضلعی متشکل از بنزن و پیریمیدین	حمید رضا مسعودی	۱۳۸
478	تأثیر یونهای Cu+ و Cu ۲+بر پایداری جف تشدگی زانتین – اوراسیل: یک مطالعه نظری	حمید رضا مسعودی	۱۳۹
497	لایه انتقال دهنده حفره کارآمد در دیود ساطع کننده نور مبتنی بر نقاط کوانتومی پروسکایت	مصطفى مسلم پور	14.
490	بررسی اثرات داروهای سکروپین B و داکومیتینیب بر غشا مدل سلول های سالم ریه انسانی با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی	هانیه معصومی بالسینی	141
497	بررسی اثرات نوع فاز بر تعامل یونهای نیکل با نقاط کوانتومی مولیبدن سولفید	لیلا مفتون آزاد	147
۵۰۳	رهایش کنترل شده داروی بتامتازون با استفاده از ساختارهای مزوحفره سیلیکایی سه بعدی	مرضیه حقیقی	147
۵۰۶	سینتیک تخریب فوتوکاتالیزوری پارا دی متیل آمینو-پارا آزوبنزن سولفونیک اسید در محیط بافری با استفاده از تیتانیم دی اکسید نانو ساختار	مرتضی منتظر ظهوری	144
5.9	تخریب نوری ۳ و ۷ -دی آمینوفنوتیازین- ۵ -ایوم کلرید در حضور فوتوکاتالیزور روی اکسید نانو ساختار در محیط بافری : یک مطالعه سینتیکی	مرتضی منتظر ظهوری	140
۵۱۲	مطالعه تئوری روش NICS با محاسبات کوانتومی برای ترکیب سیکلوبوتادین وترکیبات آن بااستخلاف های مختلف	اکبرمنصوری نسب	149
۵۱۵	بررسی ضرایب عبور و بازگشت و اثرات اتلافی در پراکندگی کوانتومی ناهرمیتی	سارا موحدمنش	141

XX

دانشگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

، فنرك

- 11/10

صفحه	عنوان	ارائەدھندە	شماره
۵۱۸	سنتز و مطالعه رفتار الکتروشیمیایی NMC811 به عنوان ماده فعال کاتدی	میرقاسم حسینی	141
۵۲.	در باتری های لیتیوم-یون معرفی ترکیبات جدید برای مهار رشد سلول-های سرطان پستان توسط محاسبات 3D-QSAR	مهلا مهر پرور	149
۵۳۳	بررسی محاسباتی جذب فسژن در نانوخوشه های B40 و Ca@B40	پروین نریمانی	۱۵۰
۵۲۵	اثرات برهم کنشی ویژه و غیر ویژه حلال روی پاسخ غیرخطی نوری مرتبه سوم	زينب نصرالله زاده	101
	(ضریب شکست و ضریب جذب) متیل یلو		
527	بررسی رفتار توزیع کافئین در سیستمهای دوفازی آبی پلیپروپیلنگلیکول- نمک تتراآلکیلآمونیوم هالید	نهال نصرت پور	۱۵۲
531	بررسی پایداری ساختاری و دینامیکی آلیاژ هویسلر معکوس Li2BAg : براساس تئوری تابع چگالی	پریا نصیرزادہ	۱۵۳
۵۳۴	بررسی نظری ویژگیهای ساختاری و دینامیکی آلیاژ هویسلر معکوس Li2AlAg	پریا نصیرزادہ	104
۵۳۷	مطالعه ترمودینامیکی اثر داروی آمانتادین روی میسل شدن سورفکتانت ستیل پریدینیوم کلرید براساس اندازه گیری های هدایت سنجی	سيده فاطمه نورانى	۱۵۵
54.	تجزیه و تحلیل کامل صورتبندی و مطالعه پیوند هیدروژنی درون مولکولی در ترکیبات اکراتوکسین و فنیل آلانین	عبدالرضا نكوئى	108
642	مدلسازی و مطالعه دینامیک مولکولی برای جلوگیری از انباشتگی پروتئین آمیلوئیدبتا به کمک مهارکننده در بیماری آلزایمر	مهشید نیازی	۱۵۲
548	پیشنهاد تابعی های هیبریدی محدوده مجزا برای توصیف فرآیند شکافت ناهمسان فسفرسانس دمای اتاق	مجتبى علىپور	۱۵۸
549	بسپار بر پایه ی بنزوکینون به عنوان آند برای باتری های یون لیتیوم/سدیم/پتاسیم: یک مطالعه نظری	نگین یزدخواستی	۱۵۹
۵۵۲	مقایسه دو مایع یونی زیستی: ساختار، دینامیک و برهمکنش	پرنيان يوسفى	18.
۵۵۵	نقش نانوصفحههای گرافن اکسید در تشکیل هیدراتهای گازی متان	پرنيان يوسفى	181
۵۵۸	مطالعه محاسباتی آئروسل آلی ثانویه ناشی از اکسیداسیون ترانس- ۲ -پنتنال با رادیکال کلر	مهسا يوسفيان	188
581	فرآیندهای برخورد، پارامترهای دینامیکی، وابستگی دمایی مقادیر برخورد واکنش CN+H2 بر روی سطح انرژی پتانسیل درون یابی شده	فائزه يونسى	188





نقش الکتروشیمی در دنیای مدرن امروزی : چشم انداز و چالش ها

ميرقاسم حسينى

استاد، الکتروشیمی، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه تبریز mg-hosseini@tabrizu.ac.ir ,mirghasem.h@gmail.com

واژگان کلیدی: الکتروشیمی کاربردی،مهندسی سطح، خوردگی و تولید و ذخیره سازهای انرژی،

مقدمه:

الکتروشیمی نقشی حیاتی در دنیای مدرن امروزی در ابعاد مختلف بازی می کند. الکتروشیمی کاربردی یک علم مدرن پیشرو است که به چالش های اجتماعی در زمینه های مختلف، از جمله تبدیل و ذخیره انرژی، فرآیندها (استخراج و خالص سازی فلزات، الکترولیز و الکترودیالیز) محیط زیست، بیوالکتروشیمی ، مهندس سطح، خوردگی پوشش و حفاظت از خوردگی فلزات و بسیاری دیگر ازمسایل مهم در زندگی امروزی می پردازد. در این مقاله ابتدا به پیشرفت های اخیر در الکتروشیمی کاربردی پرداخته می شود و اینکه چگونه این زمینه به ابزاری ضروری برای نوآوری، پیشرفت، حل مسئله در دنیای مدرن و پرداختن به چالش های اجتماعی در زمینه های مختلف تبدیل شده است. سپس در ادامه نمونه هایی از اهم کارهای تحقیقاتی و فناوری که در حوزه الکتروشیمی کاربردی و صنعتی در دو دهه گذشته درآزمایشگاه پژوهشی علوم و فنون الکتروشیمی دانشکده شیمی دانشگاه تبریز انجام گرفته است، بحث خواهد شد. همچنین به چگونگی تبدیل علم و دانش به فناوری و تاسیس شرکت دانش بنیان عرفان شیمی تبریز پرداخته می شود. در زمایت چالش ها و چشم اندازهای این حوزه مهم تحقیقاتی در زندگی روزمره

روش تحقيق:

در بخش انرژی از فرآیندهای الکتروشیمیایی برای تبدیل و ذخیره انرژی استفاده می شود. این امکان توسعه فناوریهای مولد و پایدار، مانند باتریها، سلولهای سوختی، خورشیدی و الکترولیزها را فراهم می کند. بنابراین، این پیشرفتها به یکپارچهسازی منابع انرژی تجدیدپذیر کمک می کند و از حالت گذار به سمت منابع انرژی سبز و پایدارتر حمایت می کند. در زمینه محیط زیست، الکتروشیمی راه حل های جدیدی برای کنترل آلودگی و تصفیه آب ارائه می دهد(شکل ۱). در بخش تولید، الکتروشیمی نقش حیاتی در الکتروسنتز، ساخت مواد و اصلاح سطح ایفا می کند. روشهای الکتروشیمیایی، مانند آبکاری شکل دهی الکتریکی و ماشین کاری الکتروشیمیایی، برای تولید پوششهای کاربردی و محافظ و بهبود عملکرد مواد و اجزاء استفاده می شوند. این فرآیندها امکان تولید محصولات با کیفیت بالا با خواص مواد بهبود یافته و دوام بالا را فراهم می کند .



شکل ۱ : شاخه های حیاتی الکتروشیمی در دنیای مدرن امروزی

بحث و نتیجه گیری:

نمونه هایی از اهم کارهای انجام گرفته در حوزه الکترو شیمی کاربردی در آزمایشگاه به طور اجمال آورده شده است. شاید یکی از تاثیرگذارترین کاربردهای الکتروشیمی به عنوان یک فناوری سبز در تبدیل و ذخیره انرژی باشد. برای دور زدن تولید الکتریسیته از طریق احتراق محصولات مبتنی بر کربن، محققان از اصول الکتروشیمی برای جفت کردن مواد جاذب نور با مواد (۱)، پیل های سوختی با سوخت مایع ، مانند اسید فرمیک ، الکلها و هیدرید ها و پیل های سوختی میکروبی و نیز سلولهای خورشیدی آورده شده است. سنتزانواع الکتروکاتالیست ها و شناسایی و بکار گیری آنها در سل های واقعی در باتریها ، پیلهای سوختی و پیل های سوختی میکروبی بررسی شده است. در بخش دوم فعالیت های انجام شده در حوزه خوردگی ، انواع بازدارنده های خوردگی و پوشش های تبدیلی برروی فلزات بحث می گردد. بخش سوم سنتز و شناسایی انواع الکتروکاتالیست ها و های خوردگی از پوشش های تبدیلی برروی فلزات بحث می گردد. بخش سوم سنتز و شناسایی انواع الکتروکاتالیست ها و فتوالکتروکاتالیست ها در شکافت آب، فرایندهای HER و NOR , محث می گردد (۲–۳). در بخش چهارم ابرخازن ها و نهایتا پوشش های آبکاری فلزات و نیز پوشش های مخلوط اکسیدهای فلزی(MMO) (۴) و چگونگی تبدیل ایده های علمی در این حوزه به فناوری با تاسیس شرکت دانش بنیان عرفان شیمی تبریز بحث می شود.

نتيجه گيرى :

الکتروشیمی درخت تنومندی شده است که در تمام حوزه های زندگی بشر ریشه دوانده است. الکتروشیمی کاربردی نقش مهمی در پیشرفت فناوری، ارتقای پایداری و رسیدگی به چالشهای اجتماعی در زمینههای مختلف دارد. تطبیق پذیری، کارایی و قابلیت اطمینان آن، آن را به ابزاری ضروری برای نوآوری، پیشرفت و حل مسئله در دنیای امروزی تبدیل کرده است. در طی چندین سال آینده، انتظار میرود که الکتروشیمی جایگاه محکمی را در بسیاری از بخشها ایفا کند و به یک علم مرجع برای بسیاری از محقوان مختلف دارد. تطبیق پذیری، کارایی و قابلیت اطمینان آن، آن را به ابزاری ضروری برای نوآوری، پیشرفت و حل مسئله در دنیای امروزی تبدیل کرده است. در طی چندین سال آینده، انتظار میرود که الکتروشیمی جایگاه محکمی را در بسیاری از بخشها ایفا کند و به یک علم مرجع برای بسیاری از محققان تبدیل شود. این امر مستلزم توجه ویژه برای ادغام تخصص الکتروشیمیایی در برنامه های درسی آموزشی در سرتاسر جهان برای پاسخگویی به تقاضاهای در حال تحول بازار کار و تقویت نوآوری و رشد در بخش های کلیدی است. از سوی

دیگر، آینده شرکت های الکتروشیمیایی دلگرم کننده به نظر می رسد. با این حال، شرکتها باید خود را با تغییرات بازار وفق دهند و چالشهای نوظهور را به طور موثری جهت تکامل فناوری الکتروشیمیایی بررسی کنند.

منابع

[1] M.G. Hosseini, S. Mousavi hashemi, S. Murcia-López, C. Flox, T. Andreu, J. Morante, (2018) "<u>High-power</u> positive electrode based on synergistic effect of N-and WO₃-decorated carbon felt for vanadium redox flow batteries", *Carbone*, 136 (9) 444-453.

[2] R. Mahmoodi , M.G. Hosseini , H. Rasouli, (2019); "Enhancement of output power density and performance of direct borohydride-hydrogen peroxide fuel cell using Ni-Pd core-shell nanoparticles on polymeric composite supports (rGO-PANI) as novel electrocatalysts", Applied Catalysis B: Environmental, 251 (15) 37-48.

[3] M. Hosseini, M.G. Hosseini, I. Ahadzadeh, R. Najjar, (2024) "IrO₂-ZrO₂-SiO₂ ternary oxide composites based DSAs." Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, 161(9) 105548.

[4] T. Mohammadi, M.G.Hosseini, S. Diaz-Coello, E. Pastor, I. Ahadzadeh, (2024), "Monitoring of ethanol electrooxidation on highly efficient conductive RuNi metal-organic framework by mass spectrometry", Journal of Power Sources, 611 (9) 234758.



پدیده ترشوندگی: اصول و کاربردها

سعيد عزيزيان

استاد، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و علوم نفت، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، sazizian@basu.ac.ir

ترشوندگی نشان دهنده میزان پخش شدن مایع بر روی یک جامد هنگام تماس با آن می باشد. در طبیعت به طور متنوعی با پدیده تر شوندگی مواجه هستیم. به منظور سازگاری با محیط، سطح بدن جانوران و برگ گیاهان با قابلیت ترشوندگی خاصی تکامل یافته و رفتارهای منحصر به فردی را درشرایط بارندگی یا در محیط های آبی نشان می دهند. پدیده ی ترشوندگی و گسترش آن در زمینه های تحقیقاتی شیمی، فیزیک و مهندسی از اهمیت بالایی برخوردار است. برهمکنش ها در سطح مشترک مایع – جامد نقش کلیدی در تعیین رفتار ترشوندگی را دارند [1] . با ورود به قرن بیست و یکم و با پیشرفت علم و فناوری، تحقیق در مورد فرآیند تر شوندگی، عصر جدیدی را گشوده است. به لطف نوآوری فناوری، مانند تصویربرداری ویدئویی با سرعت بالا و میکروسکوپهای الکترونی، پژوهش ها در زمینه پدیده تر شوندگی با سرعت زیاد در حال رشد بوده که منجر به ساخت مواد با ترشوندگی های متفاوت و در نتیجه کاربردهای بسیار گوناگون شده است. ترشوندگی سطح از یک تعامل پیچیده بین توپوگرافی سطح درمقیاس میکرو/نانو با شیمی سطح در مقیاس مولکولی ناشی می شود[2].

در این کار ابتدا به معرفی پدیده تر شوندگی و انواع سطوح با ترشوندگی های مختلف (آبدوست، آبگریز، ابرآبگریز و غیره) پرداخته (شکل ۱)، سپس نظریه های کلاسیک و جدید که توصیف کننده پدیده ترشوندگی هستند و همچنین تکنیک های مطالعه ترشوندگی سطوح معرفی خواهند شد. در نهایت به معرفی کاربردهای جدید و متنوع سطوح با تر شوندگی های مختلف پرداخته خواهد شد[3].



شکل ۱- سطوح آبدوست و آبگریز



منابع و مراجع

- D. Daniel, et al, (2023) Communication Physics, 6, 152
 C.W. Extrand, (2016) Langmuir 32, 7697
 H. Tahzibi, S. Azizian, (2023) Advanced Engineering Materials, 2300197



شیمی محاسباتی کوانتمی سامانه های با مقیاس بزرگ

حسین فرخ پور استاد گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان، Email: h-farrokh@iut.ac.ir

شیمی نظری و محاسباتی از زمان پیدایش شان در اواسط قرن بیستم راه طولانی را پیموده اند تا امروزه به صورت مدرن در خدمت جامعه جهانی شیمی قرار گیرند. در حدود شصت سال پیش شیمی کوانتمی برای مولکولهای بسیار ساده قابل اجرا بود. بخشی از پیشرفت شیمی کوانتمی به توسعه مداوم رایانه های بسیار سریع و تلاش شیمیدانان نظری در توسعه روش های مکانیک کوانتومی سریع و دقیق برای محاسبه ساختار الکترونی اتمها و مولکولها مربوط می شود. امروزه شیمی نظری و محاسباتي مي تواند هندسه ها، انرژي ها، واكنش پذيري ها و خواص الكترونيكي قابل اعتمادي براي مولكولها ارائه دهد. چنين اطلاعاتی در درک و توضیح نتایج تجربی که در غیر این صورت تفسیر آنها دشوار بود به امری ضروری تبدیل شده است. با وجود این پیشرفتها، محاسبه دقیق ساختار و خواص سیستمهای مولکولی بزرگ با تعداد اتمهای زیاد علیرغم استفاده از کامپیوترهای پیشرفته هنوز دشوار و زمان بر است. برای غلبه بر چنین مشکلی، تلاش های زیادی انجام شده که یکی از آنها ارائه روش های هیبریدی است که به عنوان روش چند مقیاسی نیز شناخته می شود. در این روش یک سامانه بزرگ به چندین قسمت تقسیم می شود. سپس روش های نظری مختلف، از روش های بسیار پر هزینه و دقیق تا روش های کم هزینه و دقیق برای قسمتهای مختلف در نظر گرفته می شود. یکی از این روشهای هیبریدی روش QM/MM است که در آن ترکیبی از روش های مکانیک کوانتمی (QM) و مکانیک مولکولی (MM) با استفاده از میدان نیرو برای توصیف سامانه مورد نظر استفاده می شود که منجر به کسب جایزه نوبل سال ۲۰۱۳ توسط شیمیدانهای محاسباتی گردید. یکی دیگر این روش های هیبریدی روش ONIOM است که در آن علاوه بر استفاده از ترکیب روش MM و QM برای توصیف سیستم می توان از ترکیب روشهای QM مختلف در سطح نظری متفاوت برای توصیف سامانه مورد مطالعه استفاده نمود. یکی از مزیت های این روش هیبریدی این است که انرژی بدست آمده سامانه را به انرژی سامانه وقتی دقیق ترین روش QM برای توصیف آن استفاده می شود برون یابی می کند و بدین صورت امکان بررسی سامانه های بزرگ را فراهم می کند. از جمله دیگر روش های هیبریدی می توان به ترکیب کردن روشهای MM/MM و ONIOM با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) نام برد. در این سخنرانی معرفی روشهای هیبریدی ذکر شده به صورت اجمالی و ساده معرفی می شوند و سپس مثالهایی تحقیقاتی از استفاده از این روشها در گروه شیمی فیزیک دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان در همکاری با گروه های شیمی معدنی و آلی ارائه می شود.







پیشبینی چگالی فاز توده با استفاده از پروفایلهای چگالی جرمی نانوقطرات مایع یونی دوکاتیونی با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی از اساس

زهرا استادشریف معمار^۱۰*، مجید موسوی^۲

zahra.ostadsharif@sci.ui.ac.ir ۱و*- محقق پسادکتری شیمیفیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، m.mousavi@sci.ui.ac.ir ۲- استاد گروه شیمیفیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، m.mousavi

واژگان کلیدی: نانوقطرات، مایعیونی دوکاتیونی، شبیهسازی دینامیک مولکولی از اساس، پروفایلهای چگالی جرمی

۱– مقدمه

قطرات کوچک مایعاتیونی میتوانند نقش مهمی در بررسی خواص مختلف آنها در مقایسه با یک جفت یون ایفا کنند، زیرا یک جفتیونی از مایعاتیونی در فاز گازی دارای برهمکنشهای الکترواستاتیکی نامطلوب در خلاء هستند. زیرا هیچ یونی در اطراف آن برای متعادل کردن برهمکنشهای الکترواستاتیک وجود ندارد، نیروهای جاذبه بین یونها به طور کامل توسط نیروهای دافعه جبران نمیشوند و منجر به یک برهمکنش الکترواستاتیکی نامطلوب میشود. بنابراین، بهتر است برای بررسی خواص مختلف مایعاتیونی دوکاتیونی، خوشههای خنثی کوچک با بیش از یک سهگانه یونی از آنها را مطالعه نماییم (ایزگورودینا، ۲۰۰۹). این خوشههای خنثی کوچک را که قطره مینامیم میتوانند از چند میکرومتر تا چند میلیمتر باشند و بر روی یک سطح رسوب کنند یا در فاز گازی معلق شوند. در پژوهش حاضر، به این سوال پاسخ داده خواهد شد: آیا با محاسبه ی چگالی جرمی قطرات مختلف میتوان چگالی فاز توده را با دقت قابل قبول پیشبینی کرد؟

۲- روشهای محاسباتی

B3LYP/6-311++G(d,p) ابتدا ساختار ترکیب موردمطالعه یعنی (C₁(mim)₂][PF₆]2) با استفاده از مجموعه پایهی (GTH) بهشت و شانزده سه گانهی انجام شد. سپس، با استفاده از نرمافزار پکمول جعبههای شبیهسازی مکعبی حاوی یک، دو، چهار، هشت و شانزده سه گانهی یونی (IT) از این مایعیونی دوکاتیونی که نشاندهندهی قطرات با اندازههای مختلف (یعنی ITI، TIT، TIT، و ITI، و ۱۶۱۲ است و همچنین سیستم فاز توده ساخته شد و یک شبیهسازی دینامیک مولکولی کلاسیک به عنوان یک فرآیند پیش تعادلی با استفاده از نرمافزار لمپس به مدت ۵ نانوثانیه انجام شد. در ادامه، شبیهسازیهای دینامیک مولکولی از اساس (AIMD) با استفاده از نرمافزار لمپس به مدت ۳۵ نانوثانیه انجام شد. در ادامه، شبیهسازیهای دینامیک مولکولی از اساس (AIMD) با ستفاده از نرمافزار MOLOPT-DZVP-SR-GTH) با شبهپتانسیل (GTH) استفاده شد. میں نیزیک ایران مست و جہار مین کنفرانس شیمی فیزیک ایران دانتگاہ اصفہان ۲۹و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

۳- نتایج و بحث

شکل ۱ (الف) پروفایلهای چگالی جرم را به صورت توزیع شعاعی چگالی جرم در اطراف مرکز جرم قطرات موردمطالعه نشان میدهد. برای تخمین چگالی جرم متوسط هر قطره، باید شعاع و در نتیجه حجم آن قطره را تعیین کنیم. سپس، میتوان با تقسیم جرم قطره بر حجم آن، متوسط چگالی جرم آن را بهدست آورد. با توجه به روش بیان شده توسط برهم و سباستینی (برهم، ۲۰۱۸)، میتوان شعاع هر قطره را زمانی که چگالی تجمعی آن (یعنی مجموع چگالی قطره در شعاعهای مختلف) تقریباً دو برابر چگالی محلی آن (یعنی چگالی قطره در هر شعاع داده شده) باشد، تعیین کنیم. شکل ۱ (ب) چگالی تجمعی و چگالی محلی قطرات FIT و ۱۶IT را برای تعیین میانگین شعاع این قطرات نمایش میدهد. هر خط عمودی در شکل ۱ (الف) نشاندهندهی شعاع آن قطره میباشد (نقطه ای که نسبت چگالی تجمعی به چگالی محلی ۱:۲ است). شکل ۱ (الف) نشان می دهد با افزایش اندازهی قطرات، پروفایل های چگالی در فواصل بیشتر به صفر می رسند. همچنین مشاهده می شود که پروفایلهای چگالی جرمی قطرات موردمطالعه بهطور قابلتوجهی بیشتر از چگالی فاز توده است که این نتیجه با نتایج گزارش شده برای مایعاتیونی تککاتیونی مطابقت دارد (برهم، ۲۰۱۸). علاوهبراین، پروفایلهای چگالی جرمی نوسانات زیادی را در نزدیکی هسته نشان میدهند که با رشد شعاع قطرهها کاهش مییابد. این نتایج نشان میدهد که با افزایش شعاع قطرات، چگالی جرم کاهش می یابد. این نتیجه ممکن است به دلیل این واقعیت باشد که در یک قطره با اندازهی نامتناهی، چگالی جرمی متوسط به سمت چگالی فاز محلول همگرا میشود. برای تایید توضیح بالا، چگالی فاز توده با برونیابی میانگین چگالی جرمی قطرات تخمین زدهشد. به طور خاص، میانگین چگالی جرم قطرات در برابر ریشهی سوم تعداد یونهای سهگانه (یعنی یک کاتیون و دو آنیون) در هر قطره رسم گردید (شکل ۱(ج)). این نمودار نشان می دهد که یک رگرسیون خطی می تواند به مقادیر برازش داده شود تا چگالی جرمی اندازهی قطرات نامتناهی را زمانی که n(IT)^{-1/3} برابر با صفر است، برون یابی کند. با استفاده از این رگرسیون، میتوان دریافت که چگالی جرمی برونیابی شده ۱/۳۰۶۸ g.cm⁻³ تنها ۱/۱٪ از چگالی فاز توده شبیهسازی شده (1/۳۳۰ g.cm⁻³) انحراف دارد. بنابراین، می توان نتیجه گرفت که چگالی فاز محلول [PF6][C1(min)] را می توان با استفاده از میانگین چگالی جرمی قطرات ۱۲۲ تا ۱۶IT با دقت خوبی تخمین زد.



شکل ۱. (الف) پروفایلهای چگالی جرم شعاعی قطرات مختلف از مرکز جرم هر قطره که خطوط عمودی شعاع متوسط هر قطره را نشان میدهد. (ب) نمودارهای چگالی محلی و تجمعی قطرات ۴IT و ۱۶IT که برای تعریف شعاع قطرات مربوطه استفاده شدهاند. (ج) میانگین چگالی جرم قطرات در برابر n(IT^{)-۱/3} همراه با رگرسیون خطی و برونیابی در اندازهی نامتناهی قطرات.



۴- نتیجهگیری

در این پژوهش، به منظور مطالعهی رفتار نانوقطرات مختلف مایعیونی دوکاتیونی در خلاء، شبیهسازیهای AIMD را برای پنج نانوقطرهی مختلف از ۱۱۲ تا ۱۹۲۲ انجام شد. نتایج نشان داد با محاسبهی پروفایل چگالی جرمی تجمعی و محلی برای هر قطره، در نقطهای که این نسبت ۱:۲ باشد میتوان شعاع قطرات و چگالی آنها را محاسبه کرد. همچنین، نتایج نشان داد میتوان با داشتن چگالی جرمی قطرات ۱۲۲ تا ۱۶۲۲، چگالی فاز توده را تنها با ۱/۲ درصد خطا از چگالی شبیهسازی شده پیش بینی کرد.

منابع و مراجع

[1] Izgorodina, E. I., Bernard, U. L., Dean, P. M., Pringle, J. M., & MacFarlane, D. R. (2009). The Madelung constant of organic salts. *Crystal Growth & Design*, 9(11), 4834-4839.

[2] Brehm, M., & Sebastiani, D. (2018). Simulating structure and dynamics in small droplets of 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate. *The Journal of Chemical Physics*, 148(19).



ارزیابی بار و انرژی ذخیره شده در نانوخازنهای مولکولی

سید محمد اعظمی^{او*}، مهدی خیرمند^۲

ا و *- نویسنده مسئول: دانشیار، رشته شیمیفیزیک، گروه شیمی،دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، azami@yu.ac.ir kheirmand@yu.ac.ir - دانشیار، رشته شیمیفیزیک، گروه شیمی،دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، kheirmand@yu.ac.ir

واژگان كليدى: نانوخازن، پولك گرافن، ميدان الكتريكى

۱– مقدمه

الکترونیک مولکولی علم مهندسی الکترونیک در مقیاس نانو یا اندازه مولکولی است [۱–۳]. از این نظر، مکانیسم و سرعت انتقال بار از طریق یک مولکول، نقش تعیین کنندهای در تجزیه و تحلیل پدیده هدایت مولکولی دارد که البته به موقعیت مکانی و جفت شدن بین اجزای مولکول بستگی دارد [۱]. به همین ترتیب، انواع مختلفی از دستگاههای الکترونیکی نانومقیاس از جمله خازنهای مولکولی، ترانزیستورها، دیودها، سیمها و غیره وجود دارد و تحقیقات زیادی برای بررسی خواص رسانایی این دستگاهها در زمانی که در معرض پتانسیل خارجی قرار می گیرند یا به عنوان یک جزء الکترونیکی در مدار عمل می کنند، انجام شده است. [۲]. دو ویژگی اصلی خازن های (مولکولی) قابلیت ذخیره بار و انرژی است. بیشتر کارهای نظری روی خازنهای معمولی متشکل از نانوصفحات دولایه به ظرفیت کوانتومی مربوط می شوند، برخلاف ظرفیت کلی که ظرفیت قابل مشاهده را اندازه گیری می کند [۳]. از این رو، در کار حاضر، مدلی ارائه شده است تا نشان دهد چگونه انرژی ذخیره شده و ظرفیت کلی یک خازن معمولی متشکل از تکه های گرافن را می توان محاسبه کرد، جایی که خلاء به عنوان فاصله دهنده دی الکتریک در نظر گرفته می مولی

۲- نظریه پردازی و روش

انرژی کل یک خازن به عنوان یک سیستم کوانتومی بسته یک کمیت کاملاً تعریف شده ولی تعریف انرژی ذخیره شده به فرضیات بیشتری نیاز دارد. در کار حاضر، فرآیند شارژ یک نانوخازن دولایه به عنوان یک مکانیسم سه مرحلهای در نظر گرفته میشود: (مرحله اول) نانوخازن دولایه در عدم حضور میدان الکتریکی، (مرحله دوم) میدان الکتریکی خطی در امتداد بردار عمود به صفحه الکترودها اعمال میشود. و (مرحله سوم) میدان الکتریکی حذف شده و حالت الکترونیکی به مرحله دوم منجمد میشود. شکل ۱ نمای شماتیک این سه مرحله و هامیلتونین ها، انرژی ها و توابع موج مربوطه را نشان می دهد. هامیلتونینهای مراحل اول و سوم یکسان هستند و شامل عملگرهای متعارف انرژی جنبشی و پتانسیل برای یک نانوخازن منفرد است، در حالی که در مرحله دوم، برهمکنش میدان الکتریکی با الکترون اضافه می شود و در نتیجه بار به سمت خلاف جهت بردار میدان الکتریکی پمپ می شود، حالتهای الکترونی مراحل اول و دوم، توابع ویژه هامیلتونینهای مربوطه به شمار میروند ولی از
$\int_{|I|} \frac{1}{|I|} \int_{|I|} \frac{$

شکل ۱. (a) نمای سه مرحله شارژ یک نانوخازن دولایه، (b) قطبش الکترودها توسط میدان الکتریکی و (c) تقسیم فضای سهبعدی به زیر فضاهای چپ و راست.

۳- نتایج و بحث

شکل ۲، دو پولک گرافنی موازی به عنوان نانوخازن مولکولی را نمایش میدهد که در آن میدان الکتریکی در امتداد بردار نرمال به صفحات پولک ها اعمال شده است. محاسبات در سطح محاسباتی *M062X/6-31G و توسط نرمافزار Gaussian09



شکل ۲. نمای بالا و جانبی پولک گرافنی که در آن جهت بردار میدان الکتریکی و فاصله بین دو پولک به عنوان الکترود نشان داده شده است.



شکل ۳. نمودار بار ذخیره شده (C/g)، انرژی ذخیره شده (J/g)، ظرفیت خازن (F/g) بر حسب ولتاژ اعمال شده (V).

همانطور که شکل ۳ نشان میدهد، فواصل بینفلکههای پایینتر دارای ظرفیتهای بالاتر و انرژیهای ذخیرهشدهای هستند که مطابق با انتظارات کلی از ظرفیت خازنی نسبت معکوس با فاصله بین دو صفحه است. اگرچه ظرفیت های محاسبه شده در فواصل ۳/۵ آنگستروم بسیار کمتر از خازن های الکتروشیمیایی و ابرخازن ها است، اما آنها نزدیک به یک نانوخازن معمولی گرافنی هستند. به همین ترتیب، انرژی ذخیره شده در مقابل ولتاژ اعمالی خطی نیست، در حالی که این کمیت در مقابل مربع ولتاژ کاملا خطی است که با رابطه کلاسیک آن سازگار است.

alle, 19-1, 17. 17. 11. 1. 1. 1.

۴- نتیجهگیری

بار و انرژی ذخیره شده در نانوخازن مولکولی تشکیل شده از پولکهای گرافنی میتواند توسط روشهای مکانیک کوانتومی مورد ارزیابی قرار بگیرد و یک مکانیسم سه مرحلهای برای این منظور ارائه شده است. نتایج محاسبه شده تطابق خوبی با نتایج تجربی نشان میدهند که حاکی از درستی مدل مورد استفاده است.

منابع و مراجع

J.R. Heath, M.A. Ratner, Molecular Electronics, Phys. Today 56, 43 (2003).
 T.A. Su, M. Neupane, M.L. Steigerwald, L. Venkataraman, C. Nuckolls, Chemical principles of single-molecule electronics, Na. Rev. Mater. 1, 16002 (2016).
 S.V. Aradhya, L. Venkataraman, Single-molecule junctions beyond electronic transport, Nat. Nanotechnol. 8, 399 (2013).

[4] Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch, et al, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.



مطالعه نظری مکانیسم جذب آلاینده گاز دی اکسید کربن توسط مدل آنزیمیکربنیک آنهیدراز انسانی

مينا غياثى^{(و*}، حنانه السادات اقتدارى

۱ و *- دکترا، گروه شیمیفیزیک و نانو، دانشکده شیمی، دانشگاه الزهرا (ghiasi@alzahra.ac.ir) ۲- دانشجوی کارشناسی ارشد، شیمیفیزیک، شیمیفیزیک و نانو، ،دانشکده شیمی، دانشگاه الزهرا (eghtedarihanna@gmail.com)

واژگان كليدى: آنزيم كربنيك آنهيدراز، مكانيسم هيدراتاسيون، گاز دى اكسيد كربن، محاسبات DFT

۱– مقدمه

روند افزایشی انتشار گازهای گلخانه ای به ویژه گاز دی اکسید کربن که در نتیجه فعالیتهای بی رویه انسانی بوجود آمده است، محیط زیست را درگیر چالشهای بسیاری کرده است. یکی از روشهای موثر در کاهش انتشار گاز دی اکسید کربن فناوری جذب دی اکسید کربن میباشد. در این بین روشهای جذب ۲O۲ که اغلب کاربرد بیشتری دارند، بر پایه حلال های آمینی است که تاثیر مخربی بر روی محیط زیست دارند. روش جایگزین استفاده از حلالهای آبی میباشد که معمولا برای سرعت بخشیدن واکنش هیدراتاسیون ۲O۲ در حلالهای آبی از یک بایوکاتالیزور استفاده میشود. آنزیم کربنیک آنهیدراز یکی از آنزیمهای مورد استفاده در حلال آبی میباشد. برای افزایش پایداری و فعالیت آنزیمی در مقیاس صنعتی از آنزیم تثبیت شده پوسیله یک بستر مناسب استفاده می گردد تا مشکلات مرتبط با آنزیم آزاد مرتفع شود. در این کار پژوهشی مکانیسم هیدراتاسیون گاز دی اکسید کربن هم از نظر سینتیکی و هم از نظر ترمودینامیکی در دو فاز گاز و حلال پیوستار آب توسط مدلی از آنزیم کاز دی اکسید کربن هم از نظر سینتیکی و هم از نظر ترمودینامیکی در دو فاز گاز و حلال پیوستار آب توسط مدلی از آنزیم کار دی اکسید کرین هم از نظر سینتیکی و هم از نظر ترمودینامیکی در دو فاز گاز و حلال پیوستار آب توسط مدلی از آنزیم (ایزوفرم II) بوده که با استفاده از اتصال دهنده گلوتارالدهید بر روی بستر مزو پور سیلیکاتی تثبیت گردید & Ghiasi

۲- جزئیات محاسباتی

در این کار پژوهشی از نرم افزار محاسباتی گوسین ۲۰۰۹ برای انجام محاسبات و بررسی مکانیزم هیدراتاسیون CO_۲ توسط مدل آنزیمی کربنیک آنهیدراز انسانی استفاده گردید. در تحقیق مکانیزم هیدراتاسیون CO_۲، بهینه سازی ساختارها شامل بدست آوردن ساختار حالتهای گذار، انجام محاسبات فرکانس و تمامی محاسبات دیگر بوسیله نرم افزار گوسین ۲۰۰۹ انجام گرفت. کلیه محاسبات با استفاده از روش B3LYP/6-31G در دو فاز گاز و حلال انجام گرفته است.



۳- نتايج و بحث

مدل آنزیمی برگرفته از جایگاه فعال آنزیم کربنیک آنهیدراز بر روی بسیتر سیلیکاتی عامل دار شده با ۳-آمینو پروپیل تری اتوکسی سیلان و اتصال دهنده گلوتارالدهید استفاده شد. بهینه سازی مدل آنزیمی با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی و با تابعی B3LYP و مجموعه پایه *INT6-6 انجام شد. بررسی هیدراتاسیون CO₇ طبق مکانیزم لیندسکوگ انجام گرفت. در این روش سه حد واسط INT1، INT1 و INT۲ و سه حالت گذار IS1، TS1 و TS۲ و TST وجود دارد، شکل ۱. ابتدا ساختار بهینه حد واسطها با روش محاسباتی ذکر شده بدست آمد و در ادامه ساختار حالتهای گذار تعیین شد. برای بدست آوردن ساختار حالت گذار از محاسبه اسکن و سپس بهینه سازی به عنوان حالت گذار انجام گرفت. با انجام محاسبه فرکانس و بدست آمدن فرکانس موهومی ساختار حالت گذار انجام گرفت.



شکل ۱ : تغییرات انرژی پتانسیل مکانیزم هیدراتاسیون دی اکسید کربن در سه فاز گازی، حلال (۹۸= E) و در حضور مولکولهای آب (جعبه حلال) توسط مدل آنزیمیکربنیک آنهیدراز تثبیت شده روی بستر مزوپورسیلیکا.

۴– نتیجهگیری

در این کار پژوهشی مدل آنزیمی برگرفته از جایگاه فعال آنزیم کربنیک انهیدراز تثبیت شده بر روی بستر مزوپورسیلیکا به کار برده شد. در بررسی هیدراتاسیون CO₇ طبق مکانیزم لیندسکوگ سه حد واسط INT۲، INT۱ و INT۲ و سه حالت گذار TS۲، TS۱ و TS۲ بدست آمد. سپس با تشکیل نمودار تغییرات انرژی پتانسیل برای فاز گاز و حلال نتایج نشان داد که واکنش هیدراتاسیون CO_۲ در فاز حلال با سد انرژی کمتر و شرایط مطلوب تر انجام می گیرد. همچنین نتایج بدست آمده نشان می دهد که مدل آنزیمی تثبیت شده روی بستر، نقش کاتالیزوری در هیدراتاسیون دی اکسید کربن را در فاز حلال، که از نظر شیمی سبز بسیار حائز اهمیت میباشد به خوبی انجام میدهد.



منابع و مراجع

[1] Ghiasi, M., & Gholami, S. (2020). Quantum mechanical study of human carbonic anhydrase II in complex with polyamines as novel inhibitors: Kinetic and thermodynamic investigation. *Computational and .theoretical chemistry*, *1186*, 112911

[2] E., De Luca, V., Capasso, C., Rossi, M., Olivieri, G., Salatino, P., & Marzocchella, A. Peirce, S., Russo, M (**2015**). Immobilization of carbonic anhydrase for biomimetic CO ₂ capture in a slurry absorber as .cross-linked enzyme aggregates (CLEA). *Chemical Engineering Transactions*, *43*, 259-264



در سال های اخیر، مطالعه ی خواص الکترونی و ساختاری مواد دوبعدی به دلیل ویژگیهای منحصر به فرد انها، توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده است. از جمله این خواص می توان به رسانندگیهای غیر عادی الکترونی و اسپینی اشاره کرد. این رسانندگیهای غیر عادی تحت عنوان خواص توپولوژیک شناخته میشوند. یکی از این مواد که اخیراً مورد توجه قرار گرفته، شبکه ی بایفنیلن است. این ساختار به دلیل آرایش پیچیده و خواص الکترونی خاص خود، کاربردهای بالقوهای در زمینههای مختلف از جمله الکترونیک دارد[1]. یکی از روشهای کلیدی در بررسی خواص الکترونی این مواد، مدلهای تنگابست زمینههای مختلف از جمله الکترونیک دارد[1]. یکی از روشهای کلیدی در بررسی خواص الکترونی این مواد، مدلهای تنگابست در بهبود و توسعه ی نسل جدیدی از دستگاههای الکترونیکی ایفا کند و به عنوان ابزاری کارآمد در مدل سازی خواص الکترونی این مواد به کار گرفته شود. چالش اصلی در استفاده از این مدلها، بهینهسازی دقیق پارامترهای آنها به منظور به دست آوردن هامیلتونی مؤثر است. روشهای ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریهی تابعی چگالی به منظور محاسبه ساختار الکترونی مواد، برای بهینهسازی این پارامترها مورد استفاده قرار گرفتهاند. در این رهیافت، توسعه روشهای هیبریدی HSE و بسیارهای دیگر بهیندسازی این پارامترها مورد استفاده قرار گرفتهاند. در این رهیافت، توسعه روشهای هیبریدی HSE و بس ذرهای WI مکترونی مواد، برای ماستخراج هامیلتونی مؤثر با دقت بالاتری را فراهم می کنند اما دارای هزینه محاسباتی بسیار بالایی نسبت به روشهای دیگر استخراج هامیلتونی مؤثر با دقت بالاتری را فراهم می کنند اما دارای هزینه محاسباتی بسیار بالایی نسبت به روشهای دیگر ماست [3]. روش ACBNO که بر مبنای رهیافت UFT است، به عنوان جایگزینی دقیق و کمهزینه نسبت به روشهای میرای استخراج هامیلتونی مؤثر با دقت بالاتری را فراهم می کنند اما دارای هزینه محاسباتی بسیار بالایی نسبت به روشهای میرا ماست [3]. روش ماکه معرفی شده است. این روش توانایی بالایی در محاسبه دقیق خواص الکترونی مواد نسبت به روشهای مختلف مود. در این گزارش، ما به بررسی و بهینهسازی پارمترهای تنگابست و ارائهی هامیلتونی مؤثر برای سیستمهای مختلف شود. در این گزارش، ما به بررسی و بهینهسازی پارامترهای تنگابست و آرائهی هامیلتونی مؤثر برای سیستم مای مختلف آمرد از روش ابتدا به ساکن ACBNO پرداختهایم. هدف بتواند به طور دقیق خواص الکترونی این ماده را توصیف کند. با بدست آوردن هامیلتونی موثر سعی بر آن داریم تا خواص متنوع و بدیع بایفنیلن را بدست آوریم.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

۲- روش محاسباتی

در این مطالعه، شبیهسازی های ابتدا به ساکن برای بدست آوردن خواص الکترونی بایفنیلن با استفاده از بستههای محاسباتی کوانتوم اسپرسو (Quantum ESPRESSO) و AFLOWπ انجام شده است [3, 4]. در این محاسبات از تقریب گرادیانهای تعمیم یافته و تابعی تبادلی-همبستگی PBE برای محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) استفاده شده است. همچنین از شبهپتانسیلهای بقا نرمال (norm-conserving pseudopotentials) و مش بندی ا×8×8 برای نمونهبرداری از منطقه بریلوئن استفاده شده است. انرژی قطع تابع موج نیز به مقدار Rv تنظیم شده است تا همگرایی دقیق خواص الکترونی سیستم تضمین شود.به منظور محاسبه ساختار الکترونی در رهیافت UFT از روش ACBN0 استفاده شده و بسته AFLOWπ بکار گرفته شده است. در این روش پارمتر هابارد برای اتم ها به صورت خودسازگاز محاسبه شده و منجر به افزایش دقت محاسبات نظریه تابعی چگالی استاندارد می گردد.

۳- بحث و نتیجه گیری

محاسبات GW به دلیل دقت بالای خود در پیشبینی خواص الکترونی، یکی از روشهای معتبر برای مطالعه خواص الکترونی در فیزیک مواد است [5, 6]. با این حال، این روش بسیار زمانبر و پرهزینه است، عابدی و همکارانش نشان دادند که روشهای GWو ACBN0 در محاسبه خواص الكتروني با يكديگر قابل مقايسه بوده و نتايج حاصل از هر دو روش نزديك به مقادير تجربي است [7]. این سوال مطرح می شود که آیا محاسبات GW و ACBN0 برای مواد مبتنی بر کربن نظیر گرافن نیز نتایج مشابهی دارند یا خیر. به منظور مقایسه عملکرد این روش با روش GW در تولید هامیلتونی موثر، ابتدا به بررسی گرافن می پردازیم. در این مطالعه، ابتدا پارامتر جهش برای گرافن در تقریب نزدیکترین همسایه و با روش ACBN0 محاسبه شده است. این پارامتر مقدار ۳.۰۵- الکترون ولت به دست آمد. ساختارهای نواری بدست آمده از روش ACBN0 و تنگابست برای این گرافن در شکل ۱ نمایش داده شده است که به طور چشمگیری با مقادیر گزارش شده در محاسبات GW و آزمایشات تجربی مطابقت دارد [8,9]. این توافق نشان میدهد که روش ACBN0 می تواند جایگزینی مناسب و کارآمد برای محاسبات GW در سیستمهای متشکل از اتمهای کربن باشد. برای بررسی بیشتر، محاسبات ACBN0 برای شبکه بایفنیلن که از اتمهای کربن تشکیل شده است انجام شد. سپس پارامترهای مدل تنگابست تا نزدیکترین همسایهی دوم در حضور و عدم حضور تابعی ACBN0 بهینهسازی شدند. نتایج ما نشان میدهد که ساختار نواری الکترونی و پارامترهای تنگابست محاسبه شده در روش DFT به طور قابل توجهی با محاسبات انجام شده در منبع [10] مطابقت دارد. ساختار نواری بدست آمده از روش های DFT و تنگابست در شکل ۲ نمایش داده شده است. پارامترهای تنگابست، زمانی که با استفاده از ساختار نواری بدست آمده با روش ACBN0 بهینهسازی می شوند، توصيف دقيق ترى از خواص الكتروني بايفنيلن ارائه مي دهند و اعتبار اين روش را به عنوان جايگزيني مناسب براي روش پرهزينه GWتایید میکنند. ساختارهای نواری بدست آمده از روش ACBN0 و تنگابست در شکل ۳ نمایش داده شده است اند. پارامترهای تنگابست بهینه شده با روشهای PBE و ACBN0 در جدول ۱ نمایش داده شده است.





شکل ۳ : شبکهی بایفنیلن، یاخته بسیط و پارامترهای تنگابست درنظرگرفته شده

جدول ۱) پارامترهای تنگابست بهینه شده با استفاده از روش های مختلف برحسب eV (o) انرژی پتانسیل روی هر موقعیت شیکه است).

	t1	t2	t3	t4	t5	t6	t7	0
DFT	-2.81	-2.81	-2.80	0.28	-0.37	-0.03	0.13	-0.14
ACBN0	-3.10	-3.00	-2.80	0.20	-0.30	0.00	0.12	-0.20

منابع و مراجع

1- Xie, Y., Chen, L., Xu, J., & Liu, W. (2022). Effective regulation of the electronic properties of a biphenylene network by hydrogenation and halogenation. *RSC Advances*, *12*(31), 20088-20095.

2- Slater, J. C., & Koster, G. F. (1954). Simplified LCAO method for the periodic potential problem. *Physical Review*, 94(6), 1498.

3- Agapito, L. A., Curtarolo, S., & Buongiorno Nardelli, M. (2015). Reformulation of DFT+U as a pseudohybrid Hubbard density functional for accelerated materials discovery. *Physical Review X*, *5*(1), 011006.

4- Cococcioni, M., & de Gironcoli, S. (2005). Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+U method. *Physical Review B*, 71(3), 035105.

5- Hedin, L. (1965). New method for calculating the one-particle Green's function with application to the electrongas problem. *Physical Review*, 139(3A), A796.

6- Shishkin, M., & Kresse, G. (2006). Implementation and performance of the frequency-dependent GW method within the PAW framework. *Physical Review B*, 74(3), 035101.

7- Abedi, S., Ahmadpour, M. T., Baninajarian, S., Kahnouji, H., Hashemifar, S. J., Han, Z.-K., & Levchenko, S. V. (2023). Statistical analysis of the performance of a variety of first-principles schemes for accurate prediction of binary semiconductor band gaps. *The Journal of Chemical Physics*, *158*(18).

8- Reich, S., Maultzsch, J., Thomsen, C., & Ordejón, P. (2002). Tight-binding description of graphene. *Physical Review B*, 66(3), 035412.

9- Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, *81*, 109-162.

10- Mo, S., Seo, J., Son, S.-K., Kim, S., Rhim, J.-W., & Lee, H. (2024). Engineering two-dimensional nodal semimetals in functionalized biphenylene by fluorine adatoms. *Nano Letters*, 24(16), 4885-4892.



رفتار حلالیت متان تیول و هیدروژن سولفید در مایع های یونی خانواده ایمیدازولیوم: بررسی مقایسه ای از دیدگاه تجربی و شبیه سازی دینامیک مولکولی

امیر حسین جلیلی''*، نجمه قربانی'، اکرام مازندرانی^۳

۱ - دانشیار شیمی: گرایش ترمودینامیک کاربردی و مولکولی، گروه فناوریهای تصفیه گاز، پژوهشکده گاز، پژوهشگاه صنعت نفت، jaliliah@ripi.ir ۲ - دکترای شیمی: گرایش شیمی فیزیک، گروه فناوریهای تصفیه گاز، پژوهشکده گاز، پژوهشگاه صنعت نفت، qorbani1363@gmail.com ۳-دانشجوی دکترای شیمی: گرایش شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی-تهران شمال ekram_mazandarani@yahoo.com

واژگان كليدى: مايع يونى، تعادل گاز- مايع، انرژى برهمكنش، حجم آزاد القايى، ثابت هنرى، آنتروپى انحلال

۱– مقدمه

آلایندههای گوگردی، مانند هیدروژن سولفید (H₂S) و متیل مرکاپتان (CH₃SH) به دلیل مشکلات خوردگی، ایمنی و زیست محیطی باید از جریانهای گازهای صنعتی حذف شوند. هم اکنون محلولهای آبی آلکانول آمین، مانند دی اتانول آمین و متیل دی اتانول آمین، جهت کاربرد در فرایندهای جذبی در تصفیه گاز استفاده می شوند. مایع های یونی، یک خانواده جدید از ترکیبات شیمیایی، بهعنوان جایگزینی برای آلکانول آمین ها جهت کاهش مصرف انرژی، خوردگی و آلودگی محیط زیست در حال بررسی و مطالعه هستند. در این پژوهش داده های تجربی حلالیت CH₃SH در مایع های یونی بر پایه کاتیون ۱-بوتیل-۳-متيل ايميدازوليوم با آنيونهاي تترافلوروبورات ([C4mim][BF4])، هگزافلوروفسفات ([C4mim][PF6])، ترى فلورومتان سولفونات [C4mim][OTf])، و بیس(تری فلورومتیل سولفونیل) ایمید ([C4mim][Tf2N]) در بازه دمایی ۳۰۳ تا ۳۴۳ کلوین و حداکثر فشار ۱ بار گزارش شده است. ثابت های هنری و تابع های ترمودینامیکی حل شدن CH₃SH در مایع های یونی نیز محاسبه گردید. مشاهده شد که برخلاف انتظار CH₃SH از حلالیت بیشتری نسبت به H₂S برخوردار است. سپس سیستمهای خالص و دوتایی مایع یونی-اتان تیول/هیدروژن سولفید با رویکرد شبیهسازی دینامیک مولکولی و با استفاده از میدان نیروی تمام اتمی (OPLS-AA-0.8) از دیدگاه میکروسکوپی مورد مطالعه قرار گرفت. از نتایج این مطالعات یک مفهوم جدید "حجم آزاد القایی" معرفی شده است که ارتباط منطقی بین سهم آنتروپیک ترمودینامیکی در فرایند انحلال H₂SH و H₂S در مایعات یونی و فضای خالی میکروسکوپی القا شده ناشی از ورود مولکول ماده حل شده گاز به ساختار مایع یونی را فراهم میکند. محاسبه های تجزیه انرژی کوانتومی (EDA) نشان داد که سهم انرژتیک ترمودینامیکی به بر هم کنش CH₃SH و H₂S با گونههای یونی مایع یونی ارتباط دارد. محاسبات شبیه سازی نشان داد که در حضور CH₃SH حجم آزاد افزایش و در حضور H₂S کاهش می یابد. این پدیده در نهایت منجر به حلالیت بالاتر CH₃SH نسبت به H₂S میگردد. همچنین ثابتهای هنری حاصل از OPLS-AA-0.8 در سازگاری بهتری با دادههای تجربی نسبت به سایر نسخههای OPLS می باشد.



۲- اندازه گیری حلالیت

حلالیت CH₃SH در مایع های یونی به روش اشباع هم حجم، که یک روش شناخته شده استاندارد است، اندازه گیری شد. مشخصات فنی سامانه آزمایشگاهی و روش انجام تست توسط قربانی و همکاران (Qorbani et al., 2022) شرح داده شده است. متیل مرکاپتان از شرکت سیگما-آلدریچ و مایع های یونی از شرکت مرک با خلوص بیش از ۹۹٪ تهیه و استفاده گردید.

۳– شبیه سازی دینامیک مولکولی

تمامی شبیه سازی های دینامیک مولکولی با نرم افزار گرومکس (GROMACS, V. 4, 2021) با بکارگیری میدان نیروی تمام اتمی (OPLS-AA-0.8 (Doherty et al., 2017) در مجموعه های آماری NVT و NPT انجام شدند. جزئیات انجام محاسبات شبیه سازی توسط مازندرانی و همکاران (Mazandarani et al., 2025) ارائه شده است.

۴- بحث و نتیجه گیری

شکل ۱ نشان میدهد حضور CH₃SH منجر به افزایش حجم و انبساط و H₂S باعث کاهش حجم یا انقباض در مایع یونی [PF6] میشوند. به عبارت دیگر فاصله نسبی کاتیون و آنیون در این مایع یونی در حضور CH₃SH افزایش و در حضور H₂S کاهش می یابد. این نتیجه با مقدارهای حجم آزاد محاسبه شده این مایع یونی بصورت خالص (۵۲۸ nm³) و مخلوط با CH₃SH کاهش می یابد. این نتیجه با مقدارهای حجم آزاد محاسبه شده این مایع یونی بصورت خالص (۵۲۸ nm³) و مخلوط با قرار می گیرد و مولکولهای بیشتری می توانند در مایع یونی حل شوند. برعکس با کاهش حجم آزاد فضای کمتری برای حل شدن مولکول های H₂S مهیا می شود. این نتایج با مقدارهای ثابت هنری برای حلالیت متان تیول (۴۹ kPa) و هیدروژن شدن مولکول های I2S مهیا می شود. این نتایج با مقدارهای ثابت هنری برای حلالیت متان تیول (۲۰۹ kPa) و هیدروژن مشاهده شد. همچنین در این پژوهش نشان داده شد که حجم آزاد القایی مایع یونی با سهم آنتروپی انرژی آزاد انحلال CH₃SH مشاهده شد. همچنین در این پژوهش نشان داده شد که حجم آزاد القایی مایع یونی با سهم آنتروپی انرژی آزاد انحلال CH₃SH مشاهده شد. همچنین در این پژوهش نشان داده شد که حجم آزاد القایی مایع یونی با سهم آنتروپی انرژی آزاد انحلال CH₃SH می باشد. در حالیکه چنین همبستگی برای حجم آزاد مایع یونی های خالص (خط چین و نقطه های توپر) به وضوح قابل مشاهده می باشد. در حالیکه چنین همبستگی برای حجم آزاد مایع یونی های خالص (خط چین و نقطه های توپر) و جود ندارد. این می باشد. در حالیکه چنین همبستگی برای حجم آزاد مایع یونی های خالص (خط چین و نقطه های توپر) و وجود ندارد. این می باشد. در حالیکه یونی زمانی انحلال باید حجم آزاد القایی بحای حجم آزاد مایع یونی خالص مورد توجه قرار گیرد.



شکل ۱: تابع توزیع شعاعی هیدروژن اسیدی کاتیون و اتم بور آنیون در [C₄mim][PF6] خالص و در حضور مولکول های میهمان CH3SH, H2S



شکل ۲: قاعده مندی میان آنتروپی انحلال CH₃SH در مایع های یونی خانواده ایمیدازولیوم و حجم آزاد القایی

منابع و مراجع

[1] Qorbani, N. & Jalili, A.H. & Adib, B. (2022) Anomalously high solubility behavior of methanethiol in alkylimidazolium-based ionic liquids. Journal of Molecular Liquids, 350, 118529.

[2] Doherty, B. & Zhong, X. & Gathiaka, S. & Li, B. & Acevedo, O. (2017) Rivisiting OPLS force field Parameters for ionic liquid simulations, Journal of Chemical Theory and Computation, 13, 6131–6145.

[3] Mazandarani, E. & Jalili, A.H. & Adib, B. & Tahvildari, K. (2025) A comparative study on the solubility of CH₃SH and H₂S in imidazolium-based ionic liquids: A connectionist approach between free volume and Thermodynamics. Separation and Purification Technology, 353, 128555.

دینامیک کاواک پلاسمونی بر پایه هامیلتونین خطی وایبرونیک

زهرا جمشيدى

Plasmonic nanoparticles with strong and tunable absorption can concentrate the electromagneti field in sub-wavelength volumes, significantly enhancing it. This property makes plasmonic nanoparticle cavities attractive for quantum optical applications, facilitating strong light-matter interaction with few or even single emitters at room temperature. The multipolar resonances of the plasmonic cavity facilitate short-range multipolar coupling between the electronic states of the cavity and the emitters. Despite the strong coupling of these sub-diffraction limiting mode volumes plasmonic cavities typically suffer from short lifetimes due to the inherent large losses of metal nanoparticles. In this presentation, we introduce a theoretical model that accounts for the quantum nature of plasmonic structures and their lossy dynamics within the framework of linear vibronic coupling Hamiltonian. Our Hermitian formalism, integrating parameters from first-principles electronic structure calculations, can accurately characterize the ultra-confined electromagnetic field and the nonradiative dynamics of small and medium-sized metal nanocavities. The coupling between plasmonic and emitter electronic states is examined using the dipolar coupling Hamiltonian. In this model, we investigate the influence of the relative distance and orientation of emitters on the strength of coupling and the splitting of polaritonic states. Quantum dynamics simulation are performed using the multiconfiguration time-dependent Hartree (MCTDH) approach, specifically its multilayer generalization, implemented with the Heidelberg MCTDH package.



بررسی پایداری حرارتی آنزیم سیتوکروم سی انکپسوله شده در شبکه فلز-آلی IR-MOF-74-VI از طریق شبیه سازی دینامیک مولکولی

زهرا چاوش پور نطنزی^۱، ناهید فرضی^{۱و*}

^۱ شیمی فیزیک ، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان (zahra.chavoshpour@sci.ui.ac.ir) (nfarzi@sci.ui.ac.ir - دانشیار ، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه اصفهان

واژگان کلیدی: شبکه فلز-آلی، آنزیم سیتوکروم سی، انکپسوله نمودن و شبیه سازی دینامیک مولکولی

۱– مقدمه

آنزیمها بهعنوان کاتالیزورهای زیستی در سلولهای زنده، بهطور قابل توجهی واکنشهای شیمیایی را با بازدهی بالا در دما و اسیدیته ملایم تسریع می کنند، که این ویژگیها آنها را برای فرآیندهای دوستدار محیط زیست ارزشمند می سازدبا این حال، استفاده از آنزیمها در مقیاس صنعتی به دلیل حساسیت آنها به شرایط دشوار مانند دماهای بالا و PH اسیدی یا قلیایی، و همچنین چالشهای اقتصادی تولید و تصفیه آنزیمها، محدودیتهایی دارند. انکپسوله نمودن آنزیمها در چارچوبهای فلزی-آلی (MOFs) بهدلیل مساحت سطحی بالا و قابلیت تنظیم اندازه منافذ، بهعنوان یک رویکرد نوین برای بهبود پایداری حرارتی آنها مطرح شده است. VI-74-VI با ساختار مزومتخلخل، محیطی مناسب برای تثبیت آنزیمها و افزایش پایداری آنها حتی در شرایط سخت صنعتی فراهم می کند [1,2]. در این مطالعه، ابتدا آنزیم سیتوکروم سی درون شبکه فلز-آلی انکپسوله شده و سپس پایداری حرارتی سیتوکروم سی انکپسوله شده در VI-74-74 با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکول بررسی شده است. VII می می می کند [1,2]. در این مطالعه، ابتدا آنزیم سیتوکروم سی درون شبکه فلز-آلی مولکول بررسی شده است. VII می می می کند [1,2]. در این مطالعه، ابتدا آنزیم سیتوکروم سی درون شبکه فلز-آلی مولکول برسی شده است. نتایج نشان می دهد که تثبیت آنزیم در IRMOF-74-VI بدون نیاز به اصلاح سطحی، پایداری فلز-آلی آن را بهبود می بخشد و تغییرات ساختاری کمی را در بازه دمایی ۲۰۰ تا ۵۰۰ کلوین تجربه می کند. این یافته ای بانگر و نیاد آلی، باعث پایداری ساختاری بیشتری در IRMOF-74-VI می می کاری می از به اصلاح سطحی، پایداری پایهای را برای بهینه مازی ویژگیهای IRMOF در تثبیت آنزیم ها فراهم می آورد و می تواند راه حلهای موثری برای افزایش کارایی

۲- روش ها

پارامترهای میدان نیروی IR-MOF-74-VI با استفاده از ابزار OBGMX و بر اساس میدان نیروی جهانی (UFF) ایجاد شدند. به منظور افزایش دقت محاسبات، بارهای اتمی با روش نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از نرمافزار گوسین محاسبه شدند. در این محاسبات از تابع B3LYP و مجموعه پایه cc-pvdz استفاده شد و روش Chelpg برای برازش پتانسیل الکترواستاتیکی مورد استفاده قرار گرفت. در این مطالعه، شبیهسازی دینامیک مولولی هدایت شده ومحاسبات میانگین پتانسیل نیرو با قرار دادن آنزیم سیتوکروم سی در فاصله ۲.۷ نانومتری از ورودی چارچوب MOF انجام شد. نیروی خارجی به محور z اعمال شد و ثابت فنر به میزان ۱۰۰۰ کیلوژول بر مول بر نانومتر مربع و سرعت کشش برابر با ۲۰۰ نانومتر بر پیکوثانیه تنظیم شد. برای محاسبه نیروی میانگین پتانسیل(PMF)، از روش نمونه گیری چتری استفاده شد و فواصل ۲.۱ نانومتری برای اطمینان از هم پوشانی هیستو گرامها انتخاب شدند. برای ارزیابی پایداری حرارتی آنزیم محصورشده در چارچوب IR-MOF-74-VI ، شبیه سازی های دینامیک مولکولی در بازه دمایی ۳۰۰ تا ۵۰۰ کلوین برای حالت آزاد و انکپسوله شده انجام شد. تمامی شبیه سازی ها با استفاده از نرمافزار گرومکس و میدان نیروی CHARMM36 و مدل آب TIP3P اجرا شدند. در این شبیه سازی ها، محدودیت های مکانی برای اتم های روی اعمال شد و از الگوریتم LINCS برای ثابت نگه داشتن پیوندها استفاده شده است.[3-5]

۳- نتیجه گیری

این مطالعه شواهد قانع کنندهای ارائه میدهد که نشان میدهد انکپسوله نمودن آنزیم سیتوکروم (Cyt c) c در چارچوب-IR MOF-74-VI، طور قابل توجهي پايداري حرارتي آن را افزايش ميدهد. در ابتدا، به منظور انكيسوله نمودن، از شبيهسازي دینامیک مولکولی هدایتشده (SMD) استفاده شد و با نمونه گیری چتری (US) همراه گردید تا فرایند بر گشت پذیر شود. محاسبات ما تغییر مطلوب انرژی آزاد برابر با ۳۰- کیلوکالری بر مول را نشان داد که بیانگر تمایل قوی میان Cyt c و ساختار IR-MOF-74-VI است. پس از انکپسوله نمودن، پایداری حرارتی آنزیم در بازه دمایی ۳۰۰ تا ۵۰۰ کلوین به طور سیستماتیک ارزیابی شد. تحلیل مقایسهای میان حالت آزاد و محصورشده، تأثیر قابل توجه IR-MOF-74-VI بر پایداری Cyt c را نشان داد. شبیهسازیهای دینامیک مولکولی نشان دادند که افزایش دما موجب تغییرات ساختاری بیشتری در آنزیم آزاد می شود، در حالی که آنزیم محصورشده پایداری بیشتری از خود نشان میدهد. برای مثال، نتایج RMSD حاکی از آن بود که افزایش در حالت محصورشده در دماهای بالاتر کمتر می باشد. همچنین، تحلیل RMSF در دمای ۵۰۰ کلوین نشان داد که نوسانات در آنزیم آزاد تقریباً دو برابر حالت محصورشده است، و این یافته با تحلیل B-factor نیز تأیید شد که تأخیر در نایایداری آنزیم در چارچوب IR-MOF-74-VI را تأیید می کند. یکی از جنبههای مهم این مطالعه شامل بررسی فاصله بین اتم کربن پرولین ۳۰ و اتم آهن گروه هم بود. دادههای ما نشان دادند که این فاصله با افزایش دما افزایش می یابد؛ با این حال، در دماهای بالاتر از ۴۵۰ کلوین، این افزایش در حالت محصورشده بهطور قابل توجهی کمتر بود. این امر نشان میدهد که IR-MOF-74-VI به طور مؤثری یکپارچگی ساختاری Cyt c را در دماهای بالا حفظ می کند. بهبود پایداری حرارتی مشاهدهشده در آنزیم انکیسوله شده به تشکیل پیوندهای هیدروژنی، تعاملات واندروالسی و پلهای نمکی بین آمینواسیدهای سطح آنزیم و سطح داخلی -IR MOF-74-VI مي توان نسبت داد.

مراجع

^[1] Dunn, P. J., The importance of green chemistry in process research and development. *Chemical Society Reviews* **2012**, *41* (4), 1452-1461

^[2] Qi, P. X.; Beckman, R. A.; Wand, A. J. Solution structure of horse heart ferricytochrome c and detection of redox-related structural changes by high-resolution 1H NMR. *Biochemistry* **1996**, *35* (38), 12275-12286.

^[3] Garberoglio, G. OBGMX: A web-based generator of GROMACS topologies for molecular and periodic systems using the universal force field. *Journal of computational chemistry* **2012**, *33* (27), 2204-2208.

^[4] Rappé, A. K.; Casewit, C. J.; Colwell, K.; Goddard III, W. A.; Skiff, W. M. UFF, a full periodic table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations. *Journal of the American chemical society* **1992**, *114* (25), 10024-10035.

^[5] Frisch, M. gaussian 09, Revision d. 01, Gaussian. Inc, Wallingford CT 2009, 201.



بررسی جفتشدگی ناآدیاباتیکی در سطوح انرژی پتانسیل اکسیژندیفلورید

صديقه پوراستر آبادي'، مريم دهستاني'*

۱- فارغالتحصیل دکتری تخصصی، رشته شیمی، گروه شیمی فیزیک، دانشکده علوم و دانشگاه شهید باهنر کرمان s.pourestarabadi@sci.uk.ac.ir ۲ و *- استاد، رشته شیمی، گروه شیمی فیزیک، دانشکده علوم و دانشگاه شهید باهنر کرمان dehestani@uk.ac.ir

واژگان كليدى: اكسيژندىفلوريد، جفتشدگى ناآدياباتيكى، منحنى انرژى پتانسيل، تقاطع مخروطى.

۱– مقدمه

بررسی مولکول ها معمولا برمبنای تقریب بورن- اپنهایمر [۱] انجام میشوند اما تقاطع دو منحنی انرژی پتانسیل (مربوط به جفتشدن بین دو حالت الکترونی مختلف) میتواند پدیدههای غیرمنتظرهای را در فرآیندهای فتوشیمیایی، شیمیایی و بیولوژیکی مولکولهای چند اتمی ایجاد کند. این پدیدهها به علت ورود اثرات ناآدیاباتیکی ناشی از ضرایب جفتشدگی ناآدیاباتیکی(NACTs) به دلیل حضور تقاطعهای مخروطی رخ میدهد که تقریب بورن- اپنهایمر را نقض میکند [۳]. بنابراین در بررسی سطوح انرژی پتانسیل و جفتشدگی بین حالتهای الکترونی آدیاباتیکی این سیستمها، محاسبه ضرایب جفت شدگی ناآدیاباتیکی ضرورت پیدا می کند. بررسی چنین سیستم های ملزم به جابه جایی از چارچوب آدیاباتیک به دیاباتیک است که نیازمند محاسبه زاویه تبدیل آدیاباتیک به دیاباتیک است [۴]. در این تحقیق، در بررسی سطوح انرژی پتانسیل مولکول اکسیژندیفلورید (OF₂)، با توجه به مشاهده تقاطع مخروطی بین چهار تا از پایین ترین حالتهای الکترونی این مولکول به مطالعه ضرایب جفتشدگی ناآدیاباتیکی متناظر با این تقاطع مخروطی بین چهار تا از پایین ترین حالتهای الکترونی این مولکول به

۲- روش

منحنیهای انرژی پتانسیل آدیاباتیک مولکول OF_2 با روش $OF_2 = COM$ و مجموعه پایه V5Z محاسبه شده است. مختصات تقاطعهای الکترونی 1^1 ا، 1^1 ا، 1^1 ا، 1^1 ا و 1^1 B و 1^1 B در تقارن 1^2 درجه محاسبه شده است. مختصات تقاطعهای مشاهده شده بین حالتهای الکترونی تعیین و مقادیر NACT برای تقاطعهایی که امکان بررسی داشتند، محاسبه شد. به منظور مشاهده شده بین حالتهای الکترونی تعیین و مقادیر NACT برای تقاطعهایی که امکان بررسی داشتند، محاسبه شد. به منظور مضاهده شده بین حالتهای الکترونی تعیین و مقادیر NACT برای تقاطعهایی که امکان بررسی داشتند، محاسبه شد. به منظور مشاهده شده بین حالتهای الکترونی تعیین و مقادیر NACT برای تقاطعهایی که امکان بررسی داشتند، محاسبه شد. به منظور معنود بدین زاویه تبدیل آدیاباتیک به دیاباتیک و پتانسیل های دیاباتیک، باید ضرایب جفت شدگی آدیاباتیک محاسبه شوند بدین منظور مولفه زاویهای عناصر ماتریس جفتشدگی ناآدیاباتیکی بین حالتهای مورد مطالعه (τ_{ij}) با روش DDR محاسبه و در آخر زاویه تبدیل آدیاباتیک به دیاباتیک ((1) تعیین و نمودارهای پتانسیل دیاباتیک ترسیم شدند. $\alpha_{ij}(\Gamma) = \oint \tau_{ij} dQ$

کلیه محاسبات مربوط به منحنی های انرژی پتانسیل و ضرایب جفت شدگی با استفاده از نرمافزار مولپرو [۵] انجام شده است.



۳- بحث و نتايج

شکل ۱ منحنیهای انرژی پتانسیل پایینترین چهار حالت الکترونی مولکول OF_2 در بازه طول پیوند ۱/۶۰–۱/۰۰ آنگستروم محاسبه شده با روش EOM-CCSD و Acapas پایه aug-cc-pV5Z، را نشان می دهد. همان طور که از شکل ۱ ملاحظه می شود، بین حالتهای الکترونی P^{1} و P^{1} دو تقاطع در نزدیکی هم در طول های پیوند ۱/۱۲ و ۱/۱۲ و ۱/۱۰ آنگستروم (زاویه می شود، بین حالتهای الکترونی P^{1} و P^{1} دو تقاطع در نزدیکی هم در طول های پیوند ۱/۱۲ و ۱/۱۲ و ۱/۱۰ زیگستروم (زاویه یوند ۱/۲۰ و ۱/۲۰ آنگستروم (کانتور به نحوی می شود، بین حالتهای الکترونی P^{1} و P^{1} دو تقاطع در نزدیکی هم در طول های پیوند ۱/۲۰ و ۱/۲۰ و ۱/۲۰ آنگستروم (زاویه پیوند ۱۰۳/۱ و ۱/۲۰ و ۱/۹ در این می دهد. با انتخاب یک کانتور دایره ای به شعاع ۱/۵ آنگستروم (کانتور به نحوی انتخاب شده است که احاطه کننده یک تقاطع باشد) مقادیر مربوط به مولفه زاویه ای NACT بین حالتهای الکترونی P^{1} و P^{1} محاسبه زاویه ای NACT درجه با تقارن φ (پارامتر مربوط به کانتور محاسبه TAC) در شکل ۲ ترسیم شده است. محاسبه زاویه P^{1} محاسبه شد و بصورت تابعی از φ (پارامتر مربوط به کانتور محاسبه TACT) در شکل ۲ ترسیم شده است. محاسبه زاویه P^{1} محاسبه زاویه مراساس مقادیر NACT، زاویه ۶ (۱۷۲۷ درجه (تقریبا برابر با ۳) را نشان می دهد که حضور یک تقاطع را در این کانتور محاسبه در این می دهد که حضور یک تقاطع را در این کانتور محاسبه می دید.



شکل ۱ : منحنی انرژی پتانسیل OF₂ در زاویه پیوند ۱۰۳/۱ درجه با حفظ تقارن C_{2v}



شکل ۲: عناصر ماتریس دیاباتیک و نمودار NACT مربوط به جفت شدگی بین حالتهای 1¹B2 و 1¹B1

زاویه ADT حاصل از مقادیر مربوط به جفت شدگی بین حالتهای الکترونی 1¹A2 و 1¹B1 وجود یک تقاطع در کانتور مورد بررسی را تایید کرد و شکل۲ نشان می دهد که وقتی دو منحنی انرژی پتانسیل آدیاباتیک حالت های الکترونی 1¹A2 و 1¹B به هم نزدیک می شود مقدار NACT افزایش می یابد که خود نشان دهنده تاثیر حضور یک تقاطع دیگر مربوط به این دو حالت الکترونی در مجاورت این کانتور است.



در منحنی انرژی پتانسیل مولکول OF_2 ، دو تقاطع بین حالتهای الکترونی $^{11}A_2$ و $^{11}B_1$ مشاهده شد. محاسبه ضرایب جفت شدگی ناآدیاباتیکی بین این دو حالت در یکی از نقاط تقاطع و تحقق شرط کوانتش زاویه تبدیل آدیاباتیک به دیاباتیک (نزدیک شدن به مقدار π)، وجود یک تقاطع در فضای مورد بررسی را تایید می کند. این نتایج، برهمکنش قوی بین حالتهای (انزدیک شدن به مقدار π)، وجود یک تقاطع در فضای مورد بررسی را تایید می کند. این نتایج، برهمکنش قوی بین حالتهای الکترونی $^{11}A_2$ (انزدیک شدن به مقدار π)، وجود یک تقاطع در فضای مورد بررسی را تایید می کند. این نتایج، برهمکنش قوی بین حالتهای (انزدیک شدن به مقدار π)، وجود یک تقاطع در نظای مورد بردسی را تایید می کند. این نتایج، برهمکنش قوی بین حالتهای الکترونی $^{11}A_2$ و $^{11}A_1$ را تایید کرده و نزدیکی نمودارهای انرژی پتانسیل دیاباتیک نیز، احتمال حضور یک تقاطع دیگر در نزدیکی تقاطع مورد بررسی را تویت می کند.

منابع و مراجع

[1] Combes, J. M., P. Duclos and R. Seiler (1981). The Born-Oppenheimer Approximation. Rigorous Atomic and Molecular Physics. G. Velo and A. S. Wightman. Boston, MA, Springer US: 185-213.

[2] Top, Z. H. and M. Baer (1975). Nonadiabatic transitions in chemical reactions: A quantum mechanical study. Chemical Physics 10(1): 95-105.

[3] Bowman, J. M. (2008). Beyond born-oppenheimer. Science 319(5859): 40-41.

[4] Baer, M. (2002). Introduction to the theory of electronic non-adiabatic coupling terms in molecular systems. Physics Reports 358(2): 75-142.

[5] Werner, P. J. et al., MOLPRO, v 12, A Package of Ab Initio Programs (accessed: June 2013))

https://www.molpro.net/licensee/licensee.php?portal=licensee&choice=Account+information+and+ordering



شبیهسازی DFT بر روی عملکرد نانوصفحه BC2N برای تشخیص +As³⁺ در فاضلاب شهری و صنعتی

رضوان رحیمی^{او*}، محمد سلیمان نژاد^۲

۱ و *- دکتری تخصصی شیمی، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه اراک، r.rahimi1989@gmail.com ۲- استاد تمام شیمی ، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه اراک، m-solimannejad@araku.ac.ir

واژگان کلیدی: سطح As³⁺ ،BC₂N، فاضلاب شهری و صنعتی، خواص الکترونیکی، منحنی جریان-ولتاژ

۱– مقدمه

یکی از نگرانیهای گسترش صنایع و سهم آنها در آلودگی آب، وجود یونهای مضر مانند As³⁺ در فاضلابهای صنعتی یا شهری است که میتواند به سلامت انسان آسیب برساند. بنابراین، تشخیص As³⁺ در فاضلاب شهری و صنعتی برای حفظ سلامت عمومی بسیار مهم است. سمیت As³⁺ بیش از ۶۰ برابر بیشتر از As⁵⁺ است. بنابراین، هدف تحقیق حاضر جذب و حذف یونهای As³⁺ توسط نانوصفحه BC₂N است که قبلا با موفقیت سنتز شده است (Kouvetakis, 1989).

۲- جزئیات محاسباتی

تمام محاسبات تئوری تابع چگالی (DFT) با دو نرم افزار شبیه سازی انجام شد. ۱) کوانتم اسپرسو (QE) (, (QE) با مجموعه پایه موج صفحه و شبه پتانسیل Ultrasoft (Resse, 1999) و انرژی شعاع قطع برای چگالی بار ۳۰۰ (2009) و مقدار بهینهی تعداد نقاط K در منطقه اول بریلوئون ۱×۳×۳. ۲) ماژول Mol³ و انرژی شعاع قطع برای چگالی بار ۳۰۰ (Delley, 2000) با مجموعه پایه موج صفحه و شبه پتانسیل DMol³ (Nesse, 1999) و انرژی شعاع قطع برای چگالی بار ۳۰۰ (Delley, 2000) با مجموعه پایه موج صفحه و شبه پتانسیل Mol³ (Delley, 2000) با مجموعه پایه موج صفحه و شبه پتانسیل Mol³ (Delley, 2000) و انرژی شعاع قطع برای چگالی بار ۳۰۰ (Delley, 2000) با مجموعه پنه محدی دوگانه (DNP) و تعداد نقاط K ۱×۵×۳۰ ۲) ماژول Mol³ در نرمافزار متریال استدیو (DNP) و تعداد نقاط K معرب ۲۵ و شعاع قطع اوربیتال ۵.۱ آنگستروم. فضای خلاء ۲۰ Å و تابع همبستگی تبادل GGA-PBE برای مطالعه خواص مورد نظر در هر دو روش شبیه سازی استفاده شده است (Perdew, 1996). ما از روشهای TDF و DFT-D اصلاح واندروالس دور برد گریم به ترتیب برای کدهای شبیه سازی GE DMC استفاده محاسبات DMol و در می ای روش می با توابع مورد با استفاده شده است (Decley استفاده است (Decley 2000).

 $E_{ads} = E_{complex} - E_{sheet} - E_{ion}$

(۱)

 E_{g2} و E_{g1} به طور جداگانه هستند. E_{g2} و E_{g1} به طور جداگانه هستند. E_{g1} و E_{sheet} $E_{complex}$ ، $E_{complex}$ ، E_{g1} و E_{g1} به طور جداگانه هستند. E_{g1} و E_{g1} ، E_{g1} معادله معاند. E_{g1} و E_{g1} ، E_{g1} به طور جداگانه هستند. E_{g1} و E_{g1} ، E_{g2} و E_{g1} ، E_{g1} ، E_{g2} و E_{g1} ، E_{g2} ، E_{g2} · E_{g



 $\Delta E_g = \left[\frac{(E_{g2} - E_{g1})}{E_{g1}}\right] \times 100$

(٢)

۳- بحث و نتايج

در این مطالعه، فرآیند جذب و حذف یونهای ⁴8³ توسط نانوصفحه BC₂N و مفحه بر روی اثر جذب یونهای ⁴8³ بر خواص تصحیح پراکندگی (DFT-D و DFT-D) را با مجموعههای موج عددی و صفحه بر روی اثر جذب یونهای ⁴8³ بر خواص ساختاری، الکترونیکی و انتقال نانوصفحه BC₂N بررسی کردیم. نتایج نشان می دهد که یونهای جذب شده ⁴8³ در نانوصفحه BC₂N به طور قابل توجهی شکاف باند را تقریباً ۹۹ درصد کاهش می دهد و نانوصفحه را به یک بستر سنجش عالی برای یونهای ⁴⁵ As تبدیل می کند. مقادیر انرژی جذب برای پایدارترین کمپلکس As³⁺ استفحه را به یک بستر سنجش عالی برای یونهای اسپرسو و ۲۱– VP با استفاده از کد IDMG¹ است. مقادیر بار هیرشفلد روی یونهای ⁴⁵ As مقدار ۲۷– VP با استفاده از کد کوانتم را به یونها منتقل می کند. تغییرات تابع کار در کمپلکس ۶۶۵ (۲۷.۷) الکترون ولت با استفاده از کدهای (DMG¹)</sup> DP است. تغییرات شدید در تابع کار منجر به یک سیگنال مفید الکتریکی قابل تشخیص برای تشخیص یون در فاضلاب می شود. علاوه بر این، ما تأثیر جذب یون ⁴⁵ Ac ابر ویژگیهای انتقال الکترونیکی نانوصفحه او از طریق آنالیزهای انتقال الکترونیکی تحت تولتاژ بایاس ۰–۲ ولت (نمودار جریان-ولتاژ در شکل ۱) مطالعه کردیم. بیشترین حساسیت ناشی از تغییرات جزی به دلیل تفاوت در ولتاژ بایاس ۰–۲ ولت (نمودار جریان-ولتاژ در شکل ۱) مطالعه کردیم. بیشترین حساسیت ناشی از تغییرات جریان بر اثر جذب یون در ولتاژ ۲۰۰ ولت مشاهده شد. تمام نتایج با هر دو برنامه محاسباتی بسیار نزدیک است و تفاوت جزئی به دلیل تفاوت در به عنوان بستری برای استجش کارآمد و حذف یونهای سمی ⁴ه³ در کاربردهای عملی ارائه می کند.







۴– نتیجه گیری

نتایج این مطالعه نشان میدهد که نانوصفحه BC2N را میتوان به عنوان حسگر و جاذب یونی As^{3+،} به لطف جذب شیمیایی قوی، پاسخ الکترونیکی قابل توجه، تغییرات تابع کار، و تغییرات جریان تحت ولتاژ بایاس در نظر گرفت. این نتایج پتانسیل سطح BC2N را به عنوان یک بستر امیدوارکننده برای کاربردهای عملی در حذف و سنجش یونهایAs³⁺ نشان میدهد.

منابع و مراجع

[1] Kouvetakis, J., Sasaki, T., Shen, C., Hagiwara, R., Lerner, M., Krishnan, K. M., & Bartlett, N. (1989). Synthetic metals, 34(1-3), 1-7.

[2] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009). Journal of physics: Condensed matter, 21(39), 395502.

[3] Kresse, G., & Joubert, D. (1999). Physical review b, 59(3), 1758.

[4] Delley, B. (2000). The Journal of chemical physics, 113(18), 7756-7764.

[5] Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Physical review letters, 77(18), 3865.



دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

زهرا رضاپور'، محمدتقي حامدموسويان^۲*، محمد رزمخواه^۳ ، فاطمه موسوى بايگي[†]

۱ - دانشجوی دکتری، مهندسی شیمی، شیمی، مهندسی و دانشگاه فردوسی مشهد (Zahra.rezapour@mail.um.ac.ir) ۲ و *- نویسنده مسئول: استاد، مهندسی شیمی، شیمی، مهندسی و دانشگاه فردوسی مشهد (mosavian@um.ac.ir) ۳- استادیار ، مهندسی شیمی، شیمی، مهندسی و دانشگاه فردوسی مشهد (mohammad.razmkhah@mail.um.ac.ir)

واژگان کلیدی: مایعات یونی آمینواسیدی، کارواکرول، گروه عاملی، شبیهسازی دینامیک مولکولی.

۱– مقدمه

تقاضای موادغذایی سالم باعث ظهور افزودنیهای گیاهی شده است. کارواکرول (CAR) ترکیب زیستی گیاهی با فرمول شیمیایی C₁.H₁¢O و خواص آنتی اکسیدانی، آنتی باکتریایی و ضدسرطانی است و در گیاهانی مانند پونهی کوهی و آویشن یافت می شود و در صنایع غذایی، آرایشی و بهداشتی کاربرد دارد. خواص بینظیر CAR باعث الزام استخراج آن از گیاهان حاوی این می شود و در صنایع غذایی، آرایشی و بهداشتی کاربرد دارد. خواص بینظیر CAR باعث الزام استخراج آن از گیاهان حاوی این می شود و در صنایع غذایی، آرایشی و بهداشتی کاربرد دارد. خواص بینظیر CAR باعث الزام استخراج آن از گیاهان حاوی این ترکیب زیستی شده است. استخراج با حلال روشی مطلوب برای استخراج این ترکیبات است که حلال انتخابی بسیار مهم می باشد. به دلیل ار تباط مستقیم CAR با سلامت مردم، استفاده از حلال های سبز اهمیت می یابند. مایعات یونی آمینواسیدی (AAILs) با خواصی مانند فشاربخار کم، حلالیت و زیست تخریب پذیری بالا، سمیت بسیار پایین و پایداری گرمایی و شیمیایی بالا امروزه با خواصی مانند فشاربخار کم، حلالیت و زیست تخریب پذیری بالا، سمیت بسیار پایین و پایداری گرمایی و شیمیایی بالا امروزه با خواصی مانند فشاربخار کم، حلالیت و زیست تخریب پذیری بالا، سمیت بسیار پایین و پایداری گرمایی و شیمیایی بالا امروزه به عنوان حلالهای سبز اهمیت می یابند. مایعات یونی آمینواسیدی (AAILs) با خواصی مانند فشاربخار کم، حلالیت و زیست تخریب پذیری بالا، سمیت بسیار پایین و پایداری گرمایی و شیمیایی بالا امروزه به عنوان حلالهای سبز مورد توجهاند. در این پژوهش برهم کنش AAR با عمیدازولیوم با سه گروه کربوکسیل (OOH)، آمین گلایسینات مورد بررسی قرار می گیرد. به حوی که زنجیره ی پروپیل ایمیدازولیوم با سه گروه کربوکسیل (OH) عامل دار و نقش ساختار کاتیون در برهم کنش AAIL با CAR با هم هرد مطالعه قرار می گیرد. به تحری کاروین در برهم کنش AAIL با هم هرد مطالعه قرار می گیرد. (OOH) و هیدروکسیل (OH) و هیدروکسیل (OH) و نقش ساختار کاتیون در برهم کنش AAIL با هم هرو می و روسیل (OH) و می در و OH) و هیدروکسیل (OH) و می دروکسیل (OH) و نقش ساختار کاتیون در برهم کنش AAIL و می می در و می می در و می می در و OH) و می در و می می در و می کیرد. و OH) و می در و OH) و می در و می می می در و OH) و می در و می می در و OH) و می در و می می در و می می می در و OH) و می در و OH

۲- روشها

ساختار الکترونی گونهها در سطح محاسباتی B3LPY/6-311++(d,p) بهینهسازی و با روش NBO بارهای جزئی اتمی محاسبه شد. با توجه به توده بودن سیستمها شبیهسازی در جعبهی مکعب انجام و ۲۱۶ جفت یون و ۴ مولکول CAR در نرمافزار دی_ال پلی ۲۱۸۸ تکرار شد. از میدان نیروی AMBER استفاده و شبیهسازی در دمای K ۵۸/۱۵ K و فشار ۱ atm انجام شد. شعاع قطع Å ۸۱و گام زمانی ۱ st ۱ بوده و شبیهسازی به مدت ۳۵ mS صورت پذیرفت.



۳- بحث و نتیجهگیری

بررسی نتایج حاصل از تابع توزیع فضایی (SDF) (شکل ۱) نشان میدهد چگالی احتمال حضور آنیون (ابر بنفش) در اطراف CAR بیشتر از کاتیون (ابر قرمز) است. این در حالی است که بیشترین چگالی احتمال حضور مربوط به آنیون ⁻[GLY] در حلال [PNH2[MIM]] میباشد. همچنین مسیر حرکت CAR در کل زمان شبیه سازی رصد شد و مطابق با شکل ۲، CAR در سیستم [PMIM][GLY] میباشد. همچنین مسیر حرکت CAR در کل زمان شبیه سازی رصد شد و مطابق با شکل ۲، CAR در سیستم [PMIM][GLY] میباشد. و در سیستم [GLY][GLY] کمترین جابه جایی را داشته که نشان ۱ز درگیری بالای CAR با آنیون ⁻[GLY] این حلال دارد. تر تیب نتیجه ی SDF و مسیر حرکت CAR یکسان و به صورت زیر است: [POHMIM][GLY] < [POHMIM][GLY] (GLY] (POHMIM]]



نتایج تابع توزیع شعاعی (RDF) بیان می کند آنیون نسبت به کاتیون برهم کنش شدیدتری با CAR برقرار می کند. بنابراین، در تأیید نتایج قبل مشخص می شود آنیون نقش تأثیر گذارتری در انحلال CAR دارد. نمودار RDF که در شکل ۳ آمده است مشخص می کند عامل دار کردن کاتیون باعث افزایش شدت برهم کنش آنیون-CAR و کاتیون-CAR می شود. همچنین نتایج نشان می دهد گروه عاملی NH₂ نسبت به دو گروه عاملی دیگر در انحلال CAR موفق تر عمل می کند.



شکل ۳- نمودار RDF آنیون-کارواکرول و کاتیون کارواکرول در حلالهای مورد مطالعه



منابع و مراجع

[1] Ab Rahim, A. H., Yunus, N. M., Jaffar, Z., Allim, M. F., Zailani, N. Z. O., Fariddudin, S. A. M., Abd Ghani, N., & Umar, M. (**2023**). Synthesis and characterization of ammonium-based protic ionic liquids for carbon dioxide absorption. RSC advances, 13(21), 14268-14280.

[2] Hoca, M., Becer, E., & Vatansever, H. S. (2023). Carvacrol is potential molecule for diabetes treatment. Archives of Physiology and Biochemistry, 1-8.

[3] Rathod, N. B., Kulawik, P., Ozogul, F., Regenstein, J. M., & Ozogul, Y. (**2021**). Biological activity of plantbased carvacrol and thymol and their impact on human health and food quality. Trends in Food Science & Technology, 116, 733-748.

[4] Roosta, M., Ghaedi, M., Daneshfar, A., & Sahraei, R. (2015). Ultrasound assisted microextraction-nano material solid phase dispersion for extraction and determination of thymol and carvacrol in pharmaceutical samples: Experimental design methodology. Journal of Chromatography B, 975, 34-39.

[5] Smith, W., & Forester, T. (**1996**). DL_POLY_2. 0: A general-purpose parallel molecular dynamics simulation package. Journal of molecular graphics, 14(3), 136-141.



۲- روش

با توجه به شکل (۱) با درنظر گرفتن پتانسیل به صورت مستطیلی ساده، مولکولهای گاز برای عبور از غشا از چهار منطقه عبور میکنند: (۱) منطقه فاز گازی که مولکولهای گاز در فاصلهای دور از غشا قرار دارند (منطقه I). انتقال این مولکولها متناظر با جریان ورودی از سمت راست و جریان بازتابی به سمت چپ هستند؛ (۲) منطقه جذب درون چاه پتانسیل (منطقه II). مولکولهای گاز در این ناحیه به داخل چاه پتانسیلی که قبل از رسیدن مولکولها به حفرهها قرار دارد، پخش می شوند؛ (۳) مولکولها به دلیل نیروهای دافعه مرتبط با عبور از منطقه فشرده حفرههای نانو به سدی برای عبور برخورد می کنند (منطقه III)؛ (۴) مولکولهای گاز در صورت عبور از سد پتانسیل به فضای باز منتقل می شوند(منطقه IV).



شکل ۱ : نمودار شماتیک عبور مولکول ها از میان حفره غشا. خط پر پتانسیل واقعی و خط چین مدل پتانسیل مستطیلی مورد استفاده در این تحقیق است با استفاده از معادلات تابع موج در چهار ناحیه ذکرشده و حل معادلات شرودینگر با اعمال شرایط مرزی و همچنین به کارگیری متغیرهای کاهش یافته، می توان ضرایب عبور، جذب، واجذب و بازگشت را محاسبه کرد.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

۳- بحث

با استفاده از روشهای ذکرشده در بخش قبل، با حل جبری معادلات تمام ضرایب (جذب، واجذب و بازگشت) به صورت تابعی از ضریب عبور به دست خواهند آمد. بدین ترتیب، با داشتن ضریب عبور میتوان سایر ضرایب ذکرشده را محاسبه و بررسی کرد. احتمال عبور به صورت کاهشیافته (بیبعد) مطابق با معادله (۱) به دست آمد.

$$|T|^{2} = \frac{4\tilde{k}^{2}\tilde{k}''^{2} \left[\left(\tilde{k}^{2} + \tilde{k}'^{2} \right)^{2} sin^{2} (\tilde{k}'\tilde{d}) + 4\tilde{k}^{2} \tilde{k}'^{2} cos^{2} (\tilde{k}'\tilde{d}) \right] / \left(\tilde{k}' - \tilde{k} \right)^{2}}{\left| \mathfrak{D} \left(\tilde{k}, \tilde{k}', \tilde{k}''; \tilde{d}, \tilde{\delta} \right) \right|^{2}}$$
(1)

به طوری که مخرج کسر $\left|\mathfrak{D}(\tilde{k}, \tilde{k}', \tilde{k}''; \tilde{d}, \tilde{\delta})\right|^2 = (\tilde{k}^2 + \tilde{k}''^2)(\tilde{k}'^2 \mathcal{P}^2 + \tilde{k}^2 \mathcal{R}^2)$ میباشد که در آن، می باشند. $\mathcal{P} = \tilde{k}' \sinh(\tilde{k}''\tilde{\delta}) - \tilde{k}'' \cosh(\tilde{k}''\tilde{\delta}) = \mathcal{R} = \tilde{k}' \sinh(\tilde{k}''\tilde{\delta}) \cos(\tilde{k}'\tilde{d}) - \tilde{k}'' \cosh(\tilde{k}''\tilde{\delta}) \sin(\tilde{k}'\tilde{d})$ همچنین بزرگی اعداد موجی $k' = \frac{\sqrt{2m(\epsilon_b - \epsilon)}}{k}$, $k = \frac{\sqrt{2m(\epsilon_b - \epsilon)}}{k}$ ، $k = \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{k}$ تعریف شدهاند که انرژی جنبشی مولکول ورودی، ϵ_{aa} عمق چاه پتانسیل مولکولی (انرژی جذب)، $\epsilon_{
m b}$ سد پتانسیل مولکولی، d پهنای چاه ϵ $ilde{z}=rac{z}{2}$ پتانسیل، δ پهنای سد انرژی، m جرم مولکول و \hbar ثابت پلانک کاهشیافته است. متغیرهای کاهشیافته نیز به صورت $ilde{z}= ilde{z}$ شخص شد (۱) مشخص شد , $\tilde{d} = \frac{d}{\delta}$, $\tilde{\delta} = 1$, $\tilde{k} = k\delta$, $\tilde{k'} = \sqrt{\tilde{k}^2 + \tilde{k}_{ad}^2}$, $\tilde{k''} = \sqrt{\tilde{k}_b^2 - \tilde{k}^2}$ که شاهد تکینگی در احتمال عبور هستیم که باعث پیدایش پدیده رزونانس می گردد. اگر شرایط فیزیکی حالت رزونانس را تامین کند، در این صورت جداسازی سامانهها یا ایزوتوپهای مختلف یک مولکول با بیشینه بازدهی رخ میدهد. برای داشتن رزونانس با استفاده از پتانسیل مورد بررسی در این پژوهش باید شرط $-\epsilon_{ad} = \frac{1}{2m} \left(\frac{(n+\frac{\pi}{4}\hbar)}{d} \right)^2 - \epsilon_{ad}$ کلی برای تمام سامانهها است و وابسته به جرم و پارامترهای غشا و سامانه است. به طور مثال، با استفاده از این معادله دمای مورد نیاز برای ایجاد رزونانس برای هر یک از ایزوتوپ های ¹⁶O₂ و ¹⁸O₂به ترتیب با ۱۱۱و K ۸ برابر است. بنابراین، با استفاده از معادله حاصل شده، می توان دما و انرژی فرودی (که با شتاب دهنده قابل کنترل است) را به نحوی تنظیم کرد که بهترین شرایط برای جداسازی ایزوتوپها یا مولکولها از یک غشا فراهم شود. از طرف دیگر، با درنظر گرفتن معادله (۱) می توان به تاثیر ، سد انرژی، انرژی چاه پتانسیل و نسبت پهنای چاه پتانسیل به پهنای سد انرژی رسید. با بررسی مقادیر مختلف اعداد موجی $ilde{k}$ و $ilde{K}_{ad}$ و همچنین $ilde{d}$ میتوان دریافت که هرچه مقادیر اعداد موجی کاهشیافته $ilde{k}_{ad}$ و $ilde{k}_b$ کوچکتر باشد، یا به عبارتی $ilde{k}_{ad}$ دیگر، با داشتن حفره و مولکول مشخص، هرچه انرژی چاه پتانسیل و سد پتانسیل کمتر باشد، احتمال عبور بالاتر خواهد بود. همچنین به ازای اعداد موجی کاهش یافته $ilde{k}_{ab}$ و $ilde{k}_{b}$ ثابت، مقدار بهینهای برای نسبت پهنای چاه پتانسیل به پهنای سد پتانسیل برای رسیدن به بیشینه احتمال عبور به دست میآید که میتواند به ساخت و یا تنظیم غشا برای جداسازی هرچه بهتر در سامانه مشخص مورد نظر کمک کند.



۴- نتیجهگیری

در این مقاله با بررسی تحلیلی احتمال عبور ذرات از غشا مشاهده گردید که در نقاطی شاهد تکینگی هستیم که منجر به ایجاد پدیده رزونانس می گردد. همچنین به منظور رسیدن به مقدار بیشینه احتمال عبور، تاثیر مقادیر چاه پتانسیل، سد انرژی و نسبت پهنای چاه پتانسیل به سد انرژی مورد بررسی قرار گرفت.

منابع و مراجع

[1] Callan Jr, C. G., & Coleman, S. (1977). Fate of the false vacuum. II. First quantum corrections. *Physical Review D*, 16(6), 1762.



بررسی محاسباتی مکانیسم نفوذ داروی ایرینوتکان در چارچوب آلی کوولانسی بر پایه پورفیرین

محسن سروش منش^۱ ، محمد دیناری ^۲ ^{*} ، حسین فرخ پور^۳ ^{*} ۱ – دانشجو کارشناسی ارشد، شیمی آلی، گروه شیمی آلی، دانشکده شیمی و دانشگاه صنعتی اصفهان dinari@iut.ac.ir و *- استاد، شیمی آلی،گروه شیمی آلی، دانشکده شیمی و دانشگاه صنعتی اصفهان، h-farrokh@iut.ac.ir ۲ و *- استاد، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه صنعتی اصفهان، h-farrokh@iut.ac.ir

واژگان کلیدی: شبیه سازی دینامیک مولکولی، چارچوب های آلی کوولانسی، ضریب نفوذ دارو، دارورسانی هوشمند

۱–مقدمه

تزریق مستقیم داروهای ضد سرطان نه تنها بر سلولهای سرطانی بلکه بر سایر سلولهای بدن نیز اثر داشته و به دلیل پایین بودن گزینش پذیری منجر به بروزعوارض منفی متعددی میشود. عوارض ناشی از شیمی درمانی سبب شده است که مطالعات بر روی سیستمهای دارورسانی کنترل شده و هدفمند گسترش یابد (کوماری، ۲۰۱۶). بدین منظور از نانوحاملها به علت مساحت سطح و ظرفیت زیاد بارگیری دارو استفاده میشود. چارچوبهای آلی کووالانسی (COF) دسته ای از پلیمرهای آلی متخلخل هستند که به دلیل مساحت سطح بالا، چگالی کم، حفرات قابل تنظیم و پایداری ویژه امروزه کاربرد آنها به عنوان حامل در دارورسانی هدفمند مورد توجه محققان قرار گرفته است (محوری، ۲۰۲۴). هدف این مطالعه بررسی مکانیسم و ضریب نفوذ داروی ایرینوتکان در حفره COF بر پایه پورفرین با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی می باشد.

۲-روش

ساختار مربوط به COF و داروی ایرینوتکان توسط گوسویو رسم و با استفاده از روش (d,p) B3LYP/6-31g بهینهسازی شدند. به منظور شناسایی بهترین کانفورمر دارو درون حفره COF، محاسبات داکینگ مولکولی توسط نرم افزار Autodock4 با الگوریتم ژنتیکی لامارکین اجرا شد. در محاسبات دینامیک مولکولی از نرم افزار GROMACS و میدان نیروی CHARMM36 استفاده شد. شبیهسازی دینامیک مولکولی به مدت ۲۰۰ نانوثانیه انجام گردید. برای محاسبه نفوذ دارو در حفره COF، در ادامه ۲۰۰ نانوثانیه شبیهسازی ، ۲۰ شبیهسازی به مدت ۳ نانوثاینه با seed های تصادفی انجام شد و با به کارگیری روش برازش حداقل مربعات از فایلهای مسیر (trajectory) ، ضریب نفوذ دارو محاسبه شد (نژاد، ۲۰۲۰). همچنین به عنوان منبع، ضریب نفوذ دارو در داخل آب نیز محاسبه گردید.



شکل ۱. بهترین کانفورمر دارو ایرینوتکان (سبز) در داخل حفره COF

۳–بحث

ده لایه COF با فاصله بین لایهای NN 0.54 بصورت فرم پوشیده AA توسط نرم افزار VMD ساخته شد (ونگ، ۲۰۱۱). پس از انجام داکینگ مولکولی، ۸۹ خوشه یافت شد که بهترین کانفورمر دارو در پرجمعیت ترین خوشه با انرژی اتصال kcal/mol 10.35- به عنوان فایل ورودی برای شبیه سازی دینامیک مولکولی انتخاب شد (شکل ۱). داروی ایرینوتکان در طول شبیه سازی بطور کامل در داخل حفره COF محبوس ماند. براساس انالیز GROMACS ، عامل اصلی برهمکنش بین دارو و حفره COF برهمکنش های واندروالسی بود. میانگین برهمکنش های واندروالسی و الکتروستاتیکی بین دارو و TOS به تر تیب COF-مرازی بطور کامل در داخل حفره COF محبوس ماند. براساس انالیز KROMACS ، عامل اصلی برهمکنش بین دارو و حفره COF برهمکنش های واندروالسی بود. میانگین برهمکنش های واندروالسی و الکتروستاتیکی بین دارو و COF به ترتیب COF-مرازی ماره در اسلی مواد دروالسی بود. میانگین مرهمکنش های واندروالسی و الکتروستاتیکی بین دارو و TOS به تر تیب COF-در مانی حافر و COF بدست آمد. محاسبه ضریب نفوذ دارو برای بهینه سازی دارورسانی کنترل شده و افزایش کارایی استراتژی های درمانی حائزاهمیت است. برای انجام این محاسبه از رابطه اینشتین استفاده شد که در آن ² میانگین مربعهای جابه جایی دارو و D ضریب نفوذ دارو می باشد (اینشتین ، ۱۹۰۶).

(۱) ضریب نفوذ دارو در داخل آب در سه بعد (n=3) و در امتداد محور حفره COF (n=1) با متوسط گیری از ۲۰ شبیه سازی به تر تیب 506 um²/s و 2/5 um² 9 بدست آمد.

۴-جمعبندی و نتیجهگیری

COF نتایج حاصل از شبیه سازی دینامیک مولکولی نشان داد که عمده برهمکنشهای بین دارو ایرنیوتکان با حفره COF برهمکنشهای واندروالسی بخصوص برهمکنشهای π می باشد. کاهش پنج برابری ضریب نفوذ دارو در داخل حفره COF نسبت به آب، بیان کننده کارایی بالای این نانوماده به عنوان یک بستر موثر برای رهایش کنترل شده این دارو می باشد.

منابع و مراجع

- Kumari, P.; Ghosh, B.; Biswas, S. Nanocarriers for cancertargeted drug delivery. J. Drug Targeting 2016, 24 (3), 179–191.
- (2) Mehvari, F.; Ramezanzade, V.; Asadi, P.; Singh, N.; Kim, J.; Dinari, M.; Kim, J. S. A panoramic perspective of recent progress in 2D and 3D covalent organic frameworks for drug delivery. Aggregate 2024, 5, No. e480.



- (3) Nejad, M. A.; Umstätter, P.; Urbassek, H. M. Boron nitride nanotubes as containers for targeted drug delivery of doxorubicin. J. Mol. Model. 2020, 26 (3), 54
- (4) Wan, S., Gándara, F., Asano, A., Furukawa, H., Saeki, A., Dey, S. K., ... & Yaghi, O. M. (2011). Covalent organic frameworks with high charge carrier mobility. *Chemistry of Materials*, 23(18), 4094-4097.
- (5) Einstein, A. (1906). On the theory of the Brownian movement. Ann. Phys, 19(4), 371-381.



محمد صالحی اردلی^{۱و*}، پییر سارسابل^۲، رضا امیدیان^۳.

(mohammad.salehi.chem@gmail.com) - دانشجو، شیمی فیزیک،دانشکده شیمی دانشگاه اصفهان، (mohammad.salehi.chem@gmail.com) - 1 2- Professor, Spectroscopy, physucal chemistry,Institute des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), CNRS, Université Paris Saclay, (pierre.carcabal@gmail.com)

۳- دانشیار ، شیمی کوانتوم و طیق سنجی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی دانشگاه اصفهان،(<u>romidyan@sci.ui.ac.ir)</u>

واژگان کلیدی: چشم انداز ساختاری کربوهیدرات ها، برهمکنش های غیر کووالانس، برهمکنش قند-پپتید، طیف سنجی IR فاز گازی، نظریه تابعی چگالی (DFT)

۱– مقدمه

کربوهیدراتها بهعنوان مهمترین ترکیبات زیستی، علاوهبر نقش شناخته شده شان بهعنوان منبع انرژی، بهعنوان واسطههای شناسایی مولکولی نیز عمل میکنند و اطلاعات را در قالب کد قند منتقل می سازند. به دلیل انعطاف پذیری ساختاری، کربوهیدراتها قادرند اطلاعات غنی را از طریق پیوندهای هیدروژنی غیر کووالانسی با سایر مولکول های زیستی مانند پپتیدها انتقال دهند. این حوزه تحقیقاتی، به ویژه با توجه به پتانسیل گلیکوتراپی ها به عنوان نسل جدید داروها، به یکی از مباحث مهم علمی تبدیل شده است¹. شناسایی برهمکنش های غیر کووالانسی بین قند و پپتید و تطابق ساختاری آنها، اولین مرحله در این فرآیند است. در این راستا، کمپلکس غیر کووالانسی بین قند و پپتید و تطابق ساختاری آنها، اولین مرحله در این فرآیند است. در این راستا، کمپلکس غیر کووالانسی بین قند و پپتید و تطابق ساختاری آنها، اولین مرحله در این فرآیند است. در این راستا، کمپلکس غیر کووالانسی ساختارهای مؤثر در بازتولید طیفهای تجربی، از طیف سنجی تشدید ورگانه IR/UV و محاسبات شیمی کوانتومی استفاده شد. هدف اصلی این پژوهش ارائه روشی بهینه برای انتخاب ساختارهای است که توانایی بازتولید دقیق ویژگیهای طیف تجربی را داشته باشند.

۲- روشهای تجربی و محاسباتی

روشهای طیفسنجی مولکولی با گزینش پذیری ساختاری، وجود ساختارهای متمایز را برای یک مولکول به عنوان تابعی از توان سیگنال نشان داده است. روش تشدید دوگانه IR/UV امکان دستیابی به طیف IR مخصوص یک ساختار را فراهم می کند². پس از ثبت طیف تجربی، برای یافتن ساختارهایی که توانایی بازتولید ویژگیهای این طیفها را دارند، از روش نظریه تابعی چگالی با تابعی CAM-B3LYP و مجموعه پایه (CAM-B3LYP++6/2df,2pd) استفاده شده است. تمامی محاسبات در نرمافزار گوسین (16 .V) صورت گرفت. برای تنظیم پهنای پیک در طیف های مادون قرمز هر ساختار و همچنین طیف حاصل از هم پوشانی مجموعهای از ساختارها، از کدهای پایتون بهره گرفته شد.



۳- بحث و نتیجهگیری

بتامتیل گلوکز یکی از رایجترین کربوهیدراتها است که دارای شش اتم اکسیژن میباشد، بنابراین چندین موقعیت برای برهمکنش با مولکولهای دیگر دارد. در مقابل، مولکول آلانین قرار دارد که در آن، اتم هیدروژن گروه کربوکسیلیک با یک گروه متیل جایگزینشده و اتم نیتروژن آن دارای بار مثبت است. پایداری ساختارها از طریق برهمکنش میان گروه آمونیوم (+NH3) پپتید و اتمهای اکسیژن موجود در گلوکز تنظیم میشود که منجر به ایجاد تعداد زیادی ایزومر ساختاری با توزیع پایداری میگردد³. این پایداری ناشی از تشکیل پیوندهای هیدروژنی NH…O بین گروه آمونیوم پپتید و اکسیژنهای گلوکز است. برای شناسایی ساختارهایی که بتوانند خصوصیات طیف تجربی را بازتولید کنند، طیف IR تمام ساختارها شبیهسازی شد. در نگاه اول هیچ ساختاری با قابلیت بازتولید خصوصیات طیف تجربی یافت نشد. در این مرحله، به جستجوی مجموعهای از ساختارها پرداخته شد که طیف همپوشانی آنها توانایی بازتولید طیف تجربی را داشته باشد. همانطور که در شکل ۱ ب) نشان داده شد، طيف به سه ناحيه اصلى تقسيم شد و دو ناحيه ٣٣٠٠-٣٦٠٠ و ٣٥٠٠-٣٧٠٠ سانتىمتربرثانيه مورد توجه قرار گرفت. بنابراين، تمام ساختارهایی که دو باند ارتعاشی در ناحیه ۳۳۰۰-۳۵۰۰ سانتیمتربرثانیه را بازسازی می کنند بهعنوان اولین و ساختارهایی که نوارهای نشاندادهشده در شکل ۱ ب) را بهدست میآورند، بهعنوان خانواده دوم نامگذاری شدهاند. مشاهده شد که خانواده دوم ویژگیهای طیف تجربی را به مراتب بهتر از خانواده اول بازتولید میکند، با این حال، هنوز عدم تطابق قابلتوجهی بین طیفتجربی و طیفهایشبیهسازیشده، بهویژه در ناحیه آبی طیف، وجود دارد. بنابراین، در این مرحله، ساختارها بر اساس نوع پیوند هیدروژنی بین قند و پپتید دسته بندی شدند. از اینرو هم پوشانی طیف شبیهسازیشده گروه O3.4 از خانوادهاول و همچنین هم پوشانی طیفشبیهسازی شده گروههای دارای پایدار ترین و قوی ترین برهمکنش از خانواده دوم بدست آمد و در شکل ۱ ج) نمایش داده شده است. روش در نظر گرفته شده، نوارهای ارتعاشی تجربی واقع در قسمت آبی طیف تجربی را بازتولید می کند. با این حال، بررسی دقیقتر برای نمایش کل طیف تجربی مورد نیاز است که با در نظر گرفتن ساختارهای دارای پیوند هیدروژنی درون مولکولی بدست آمد (شکل ۱ د). در نهایت مشخص شد که ویژگی های طیف تجربی از طریق برهمنهشت این دو مجموعه در شکل ۱ ه) قابل بازتولید است.



شکل ۱ : الف) کمپلکس قند-پپتید ب) طیف IR تجربی کمپلکس بتامتیل گلوکز-متیل آلانین پروتون دار شده، ج) هم پوشانی طیف های شبیه سازی شده از گروه ۵٫4 د) ساختارهای دارای پیوندهای هیدروژنی درون مولکولی ه) برهم نهی حاصل از طیف های ج و د.



منابع و مراجع

[1] Doores, K.J, & Gamblin, D. P. (2006). Exploring and Exploiting the Therapeutic Potential of Glycoconjugates. Chemistry–A European Journal, 12(3), 656-665.

[2] Cocinero, E.J, & Carcabal, P, & Vaden, P.D, & Davis, B.G, & Simons, J.P. (2011). Exploring Carbohydrate-Peptide Interactions in the Gas Phase: Structure and Selectivity in Complexes of Pyranosides with N-Acetylphenylalanine Methylamide. Journal of the American Chemical Society, 133(12), 4548–4557.

[3] Rijs, AM., & Oomens, J. (2015). Gas-Phase IR Spectroscopy and Structure of Biological Molecules

. Springer.



بررسی سینتیکی واکنش پیروگالول با سدیم یدات به روش تجربی و محاسبهی تغییرات تابع گیبس واکنش با روشهای نظری

مهدى طالبيان^{1.*}. منصورنمازيان^۲. على بنويدى^۳.

40030324@stu.yazd.ac.ir ، سیمی، دانشگاه یزد، namazian@yazd.ac.ir ، *- نویسنده مسئول: کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، شیمی، دانشگاه یزد، ۲ ۲- دکترا، استاد ، شیمی فیزیک، شیمی، دانشگاه یزد، abenvidi@ yazd.ac.ir ۳- دکترا، استاد، شیمی تجزیه، شیمی، دانشگاه یزد، ۳

واژگان كليدى: سينتيك شيميايى، پيروگالول، اسپكتروفتومترى UV-Vis، مرتبه واكنش، تابع گيبس

۱– مقدمه

پیروگالول (۱و۲و۳-تری هیدروکسی بنزن) یک ترکیب فنلی است که به دلیل خواص آنتیاکسیدانی و کاربردهای متعددش در صنایع غذایی و دارویی مورد توجه قرار دارد [۱٫۲]. در این پژوهش به بررسی سینتیکی واکنش پیروگالول با سدیم یدات با استفاده از روشهای تجربی پرداخته میشود و تغییرات تابع گیبس این واکنش با استفاده از محاسبات نظری تحلیل میشود.

۲- روش

در این پژوهش، جذب محلولهای حاصل از واکنش پیروگالول و سدیم یدات در شرایط اسیدی با دستگاه اسپکتروفتومتر UV-Vis اندازه گیری شد. معادله سرعت واکنش، با تغییر غلظت هر یک از اجزای معادله سرعت واکنش و محاسبهی درجهی آنها محاسبه شد. همچنین، برای محاسبه تغییرات تابع گیبس و بررسی ویژگیهای ترمودینامیکی، از نرمافزار اورکا (ORCA) اندافه شد که شامل مدلسازی ساختارها، بهینه سازی هندسی، و محاسبه انرژی سطوح HOMO و HOMO بود [۳]. این فرایند به تحلیل دقیق رفتار شیمایی واکنش کرد.

۳- بحث

در واکنش اکسایش پیروگالول [۴] توسط سدیم یدات در محیط اسیدی، پیروگالول با یدات واکنش داده و ید آزاد می شود که با افزودن نشاسته به عنوان معرف، تغییر رنگ به آبی تیره را ایجاد می کند. محاسبات نظری نیز نشان می دهد که اگر محصول واکنش ید باشد تغییرات انرژی گیبس به مراتب کوچک تری نسبت به سایر مشتقات حاصل از اکسید یدات دارد، بنابراین واکنش به صورت زیر است:

5 PY + 2 IO_3^- + 2H⁺ \rightarrow 5 PY-OX + I₂ + 6H₂O

(1)

طبق واكنش (۱)، معادله سرعت بصورت زير مي شود:

(٢)

در این پژوهش، سینتیک واکنش اکسایش پیروگالول توسط سدیم یدات در شرایط اسیدی بررسی شد. برای محاسبهی درجهی هر یک از واکنشدهندهها در معادلهی سرعت، غلظت دو گونه ثابت و غلظت گونهی سوم (x) متغیر در نظر گرفته شد و نمودار جذب بر حسب زمان هر واکنش از زمان آغاز تا پایان واکنش جذب محلولها در طول موجهای ۳۱۰ و ۴۴۰ نانومتر (که به ترتیب طول موجهای بیشینهی PY-OX و I2 است) توسط دستگاه UV-Vis رسم شد. شیب این نمودارها بیانگر تغییرات جذب بر حسب تغییرات زمان گونهی با غلظت متغیر است که برای محاسبهی درجهی آن گونه، نمودار لگاریتم ^{AB} بر حسب لگاریتم غلظت گونه یبا غلظت متغیر رسم شد که طبق رابطه (۳) شیب این نمودار درجه ی گونه (x) در معادله سرعت است.

واسكاه اصفيان ٢٩ و ٣٠ باريان ١٤٠٣

$$\ln\left(\frac{dA}{dt}\right) = k''' + m\ln\left[x\right] \tag{(7)}$$

پس از انجام محاسبات و بهدست آوردن درجهی هر یک از واکنشدهندهها، مقادیر m و n و p به ترتیب برابر ۱و ۱و ۰/۵ بهدست آمد. بنابراین معادلهی سرعت بهصورت زیر است:

$$R = k [PY]^1 [IO_3^-]^1 [H^+]^{1/2}$$

 $R = k [PY]^m [IO_3^-]^n [H^+]^p$

برای محاسبه یثابت سرعت (k)، نیاز به نمودار کالیبراسیون و محاسبه ی سرعت واکنش است. برای رسم نمودار کالیبراسیون، محلولهای مختلفی با غلظت ثابت از یدات و اسید و غلظتهای متفاوت پیروگالول ساخته شد و همهی محلولها با استفاده از آب مقطر به حجم یکسان رسیدند. پس از اتمام واکنش، جذب محلولها اندازه گیری شد و سپس نمودار جذب بر حسب غلظت پیروگالول (نمودار کالیبراسیون) رسم شد. طبق رابطه بیر لامبرت، شیب نمودار کالیبراسیون بیانگر b۶ است. برای محاسبهی ثابت سرعت واكنش ابتدا با استفاده از قانون بير-لامبرت مقدار ɛb و سپس سرعت واكنش بر اساس معادلات بهدست آمده از قانون بير-لامبرت محاسبه شد. مقدار ثابت سرعت واکنش در سطح اطمينان ۹۵٪ برابر با مقدار زير است:

$$k = r \rho / r \pm r / q L^{3/2} mol^{-3/2} s^{-1}$$

با استفاده از نرمافزار اوركا و روش B3LYP با مجموعه پايه def2-TZVP، تغييرات تابع گيبس واكنش بين پيروگالول و سديم یدات در محیط اسیدی محاسبه شد. تابع گیبس هر یک از اجزای واکنش بهطور جداگانه محاسبه و سیس با محاسبهی اختلاف مجموع تابع گیبس فراوردهها و واکنشدهندهها، تغییرات تابع گیبس واکنش بهدست آمد. برای محاسبه تابع گیبس⁺H ، این یون بهعنوان گاز ایدهآل در نظر گرفته شد و مقدار آن برابر با ۱۱۱۲/۵- کیلوژول بر مول محاسبه شد. تغییرات تابع گیبس واکنش برابر با ۲۰۶۸۵۵-۰/۱۰- هارتری یا ۵۴۳/۱- کیلوژول بر مول بهدست آمد. در روش نظری، انرژی سطوح HOMO و LUMO برای اجزای واکنش با استفاده از روش B3LYP محاسبه شد و طول موج بیشینه هر کدام با معادله پلانک به دست آمد. طول موج بیشینه PY-OX در غیاب حلال حدود ۳۶۲ نانومتر است که با مقدار تجربی ۳۱۰ نانومتر همخوانی دارد. برای ید، طول موج ۱۷۹ نانومتر مربوط به انتقالات σ به *σ و مقدار تجربی آن ۴۴۰ نانومتر مربوط به انتقال الکترونهای ناپیوندی (n) به ضدپیوندی (σ*) است.

(۵)

(۴)



۴- نتیجهگری

این پژوهش به بررسی سینتیکی واکنش اکسایش پیروگالول با سدیم یدات در شرایط اسیدی پرداخته و معادله سرعت واکنش بهصورت ¹[H⁺]¹[IO₃⁻] [IO₃⁻¹] بهدست آمده است. ثابت سرعت واکنش برابر با ¹² R⁻¹/² mol^{-3/2}s⁻¹ و تغییرات تابع گیبس برابر با ۵۴۳/۱ - کیلوژول بر مول محاسبه شده است. این نتایج به درک بهتر رفتار شیمیایی و ترمودینامیکی این واکنش کمک میکند و پتانسیل کاربردهای پیروگالول در صنایع مختلف را تقویت میکند.

منابع و مراجع

- [1] Novak, A. J.; Trauner, D. In Progress in the Chemistry of Organic Natural Products 118; Springer: 2022, p 1.
- [2] Wang, J.; Shen, X.; Yuan, Q.; Yan, Y. Metabolic Engineering 2018, 45, 134.
- [3] Neese, F. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science 2018, 8, e1327.

[4] Gill, M.; Steglich, W. "Progress in the chemistry of organic natural products"; Springer Science & Business Media, 2012; Vol. 51.


آیا امکان داشتن تغییر فاز در سیستم های شبه-یک بعدی وجود دارد؟

مهدي ظريف

استادیار، شیمی فیزیک، دانشکده علوم شیمی و نفت دانشگاه شهید بهشتی m_zarif@sbu.ac.ir

واژگان کلیدی: سیستم شبه یک بعدی، کرات سخت، نقص توپولوژیک، تغییر فاز

۱– مقدمه

نظم توپولوژیک و حالتهای محافظتشده توپولوژیک معمولاً در سیستمهای کوانتومی همبسته ظاهر میشوند [۱]، اما شواهد فزایندهای وجود دارد که نشان میدهد این ویژگیها میتوانند نقش مهمی در خواص سیستمهای کلاسیک نیز ایفا کنند [۲]. به عنوان مثال، تحقیقات نشان دادهاند که چیدمانهای متراکم کلوئیدهای ناهمسان گرد، فازهای توپولوژیکی را تشکیل میدهند که نظم تقریباً کاملی را در چگالیهای پایین تر از چیدمانهای فشرده حفظ می کنند [۳]. منبع نظم توپولوژیک در این سیستمها میدهد سیستمهای کوانتومی خود متفاوت است و از سازماندهی تماسهای ذرات درون سلول واحد تنگ چین ناشی میشود که نشان میدهد سیستمهای کلوئیدی دیگر نیز ممکن است پدیدههای مشابهی را نشان دهند. محصورسازی هندسی ذرات سخت به کانالهای باریک شبه یک بعدی منجر به تشکیل خودبه خودی ساختارهای پیچشی میشود که بسته به قطر کانال، از پیچشهای ساده تا پیچشهای چندرشتهای با ساختارهای لغزشی یا متناوب متغیر است [۴-۶]. هنگامی که قطر کانال، از پیچشهای باشد، تمام ذرات در تنگ چین متراکم با دیواره کانال تماس پیدا می کنند که این امر اجازه می دهد ساختارها و انتقالات بین آنها به صورت آرایشهای دیسکی فیلوتاکتیک (phyllotactic) در یک صفحه توصیف شوند. با افزایش عرض کانال، ساختارهای جدیدی به وجود میآیند و در نهایت، ظهور آرایشهای بلوری PC منج میجه به تشکیل ساختارهای پیچیده هسته میشود. [ین نوع ساختارها همچنین در سیستمهای کلوئیدی نرم شبه یک بعدی و در سیستمهای نانو لولهای مولکولی مشاده شده اند [ین نوع ساختارها همچنین در سیستمهای کلوئیدی نرم شبه یک بعدی و در سیستمهای نانو لولهای مولکولی مشاده نده این چرخشی جدیدی را تولید کند.

۲- روش

یک سیستم از N کره سخت با قطر σ که در یک کانال باریک استوانهای به طول L با قطر کانال S محصور شده است، که اطمینان می دهد کره ها تنها می توانند با همسایگان اول و دوم خود در هر دو جهت در طول کانال تماس داشته باشند. پتانسیلهای تعامل ذره-ذره و ذره-دیوار به صورت برهم کنش صرفا دافعهای تعریف می شوند. حجم قابل دسترس برای مراکز زرات $V_0 = \pi L$ (H0/2) $V_0 = \pi L$ (H0/2) است، که در آن $\sigma - H_0 = H_d - \sigma$ و حجم اشغال شده $(^2 JLH_d^2) / 5 \sigma = 2N \sigma^2$ می باشد. از شبیه سازی های دینامیک مولکولی (MD) و مونت کارلو (MC) استفاده شده است که شامل سیستمهایی با $N = 10^4$ دره و $H_d/\sigma = 1.95$ است. شیه سازی مولکولی است. ست. شبیه سازی های MD در مجموعه کانونی (N,V,T) با استفاده از نسخه ی اصلاح شده از الگوریتم دینامیک مولکولی برخورد-محور لوباچفسکی-استیلینگر (Lubachevsky-Stillinger) انجام می شود که سیستم را با گسترش ذرات و قطر کانال فشرده می کند به طوری که σ H_d ($N = 10^7$ N) با در است ای ا⁰ N - 10⁶ N ($N = 10^6$ C) است. می مورد معار ای می در ای معادل می مولکولی ($N = 10^7$ در محموعه کانونی ($N = 10^7$ N) انجام می شود که سیستم در ای الگوریتم دینامیک مولکولی مورد محور لوباچفسکی-استیلینگر ($N = 10^7$ N) با می می شود که سیستم در ای الی می در ات و قطر کانال می مورد معاور در ماری در ای می در ای استان در معاور در ای می در ای می در در ای می در در ای می در در معادل قبل از معروری داده ها در طول $N = 10^7$ می در در استفاده می شود.

۳- بحث و نتیجه گیری

شکل ۱ (a) معادله حالت (EOS) فشار برای سیستم را در دامنه وسیعی از چگالیها نشان میدهد. در محدوده زیر PL/k_BT~38، شبیهسازیهای فشردهسازی و انبساط سیستم منجر به یک EOS مشابه میشود که دارای یک شانه کوچک در مرکز 0.25 φ (PL/k_BT ~15) است و در حد چگالی پایین به رفتار گاز ایدهآل نزدیک می شود. در چگالی های بالاتر، دو شاخه متمایز از EOS مشاهده میشود: یک شاخه فشار بالا برای فشردهسازی و یک شاخه فشار پایین برای انبساط. شکل ۱ (b) نشان میدهد که هر دو شاخه EOS می توانند از شرایط اولیه مربوطه خود با استفاده از روشهای شبیه سازی مختلف که مسیرهای تعادل متمایزی را دنبال میکنند، بازتولید شوند. شبیهسازیهای MD از طریق یک سری متوالی از حالتهای تعادلی حرکت می *ک*نند و اساساً EOS را دنبال می کنند. شبیهسازی MC برای هر نقطه حالت بهطور مستقل از شرایط اولیه خود در فشار ثابت تعیینشده تکامل مییابد. بهویژه، EOS شاخه انبساط به آرامی همگرا میشود و شواهدی وجود دارد که نشان میدهد ساختار مايع هنوز با سرعت بسيار كندي تكامل مييابد. در حالي كه هرگز مشاهده نكردهايم كه سيستم از يك شاخه EOS به شاخه دیگر در (q > 0.33) منتقل شود، اگر سیستم از هر دو شاخه به زیر این نقطه انبساط یابد و سپس دوباره فشرده شود، همیشه شاخه فشار بالاتر را دنبال میکند. شکل ۲ (a) نشان میدهد که ظرفیت حرارتی ویژگیهای متمایزی برای شاخههای فشردهسازی و انبساط EOS نشان می دهد و همچنین یک قله در فشار پایین وجود دارد که با تغییرات در درصد نقص، (θ) nd/N) همزمان است. ما اکنون رابطه بین ترمودینامیک، دینامیک و ساختار را در سه منطقه متمایز EOS بررسی میکنیم. در شاخه چگالی پایین(φ < 0.33)، سیستم انتظار می ود که در نزدیکی حداکثر توزیع، حوضههای ساختاری ذاتی را نمونهبرداری کند. در این حالت، با افزایش فشار، تعداد نقص ها به سرعت کاهش می یابد و در نهایت به یک ناحیه تقریبا صاف در (0.25 ~ θ) می سد. در شاخه فشردهسازی ($\phi > 0.33$)، ساختار مایع شامل بخش های پیچش بهطور شل سازماندهی شده است که توسط نقصها جدا شدهاند و با افزایش فشار، (heta) دوباره شروع به کاهش میکند. در نهایت، سیستم به سمت پایینترین نقطه حوضه حرکت می کند که در آن تعداد کمی حوضه وجود دارد و(heta) دوباره به پلاتو میرسد و به آرامی به صفر میرسد. در شاخه انبساط (φ > 0.33)، ترموديناميک، ساختار و ديناميک مايع بهطور قابل توجهي با مايع فشرده متفاوت است. حالت اوليه سيستم شامل یک پیچش کامل با جهت چرخش (P) است، اما با انبساط، ظرفیت حرارتی ویژگیهای خاصی را نشان میدهد. در فشارهای بالا، (θ) به سرعت افزایش مییابد و سپس به پلاتو میرسد. این نشان میدهد که نقصها که بهصورت جفت تولید میشوند، حداقل بهطور شل جفت باقی می مانند و اجازه می دهند که بخش های پیچش (M) ایجاد شده بین نقص ها کوچک بمانند.

ماصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳



شکل ۱: (a) نتایج EOS شبیه سازی دینامیک مولکولی در مسیرفشردهسازی و انبساط در بازه کامل چگالی (φ) و (b) EOSشبیه سازی دینامیک مولکولی فشردهسازی و انبساط در محدودهی φ بالا.



شکل ۲: مقایسه ترمودینامیک، نقصها و فزونی پیچش (a) ظرفیت حرارتی در فشار ثابت، Cp/Nk، (d) کسری نقص θ (دروننمودار: رژیم فشار پایین)، (fr (c، کسری فزونی تتراهدرونهای P به عنوان تابعی از Pι/k_BT.

این مطالعه نشان میدهد که یک سیستم شبه-یکبعدی از کرههای سخت که در یک کانال استوانهای باریک (با قطر σ/d = H_d/σ) محصور شده است، در فشارهای بالای(PL/kBT~38) یا(PL/kBT~38) دو شاخه در معادله حالت (EOS) خود دارد که هر کدام ویژگیهای ترمودینامیکی، ساختاری و دینامیکی منحصر به فردی دارند. در حالی که وجود شبه پایداری و هیسترزیس در چنین سیستمهایی رایج است، برای قطرهای خاص($7/(3)/7 + H_d < 1+4\sqrt{3}$) تنها یک چیدمان پیچشی کامل وجود

دارد که باعث می شود دو شاخه EOS در چگالی بیشینه چینش همگرا شوند. شبیه سازی های ما نشان می دهد که شاخه فشرده سازی EOS به عنوان حالت تعادل سیستم است. اندازه گیری فشار در این شاخه با پیش بینی های روش ماتریس انتقال همخوانی دارد [۸]. علاوه بر این، طول همبستگی اندازه گیری شده در طول شاخه انبساط، تکامل مشابهی با طول همبستگی ویژه مقدار کوچکتر ماتریس انتقال دارد که نشان دهنده ارتباط بین حالات است و به این معناست که شاخه انبساط نمایانگر یک حالت غیر تعادلی یا شبه-پایدار است.

نتایج ما [۹] به وضوح نشان میدهد که شاخه انبساط، با جهت پیچش اضافی، در مقیاس زمانی شبیهسازی ما، علیرغم اینکه در یک حالت فشار پایین تر نسبت به شاخه تعادلی قرار دارد، شبه-پایدار باقی میماند. همچنین نشان دادیم که ویژگیهای توپولوژیکی سیال نقش مهمی در حفظ پایداری آن تا چگالیهای پایین ایفا میکند، جایی که دو شاخه معادله حالت (EOS) به هم میرسند، که نشان میدهد شاخه انبساط در واقع یک حالت توپولوژیکی تثبیتشده است. با این حال، سیال در امتداد شاخه انبساط شبهه-پایدار است و بنابراین در نهایت در طول زمان از بین خواهد رفت. مقیاسهای زمانی شبیهسازی در مقایسه با مقیاسهای زمانی تجربی کوتاه هستند، بنابراین باید دید که آیا میتوان چنین حالت تثبیتشده توپولوژیکی را در سیستمهای واقعی مشاهده کرد و آیا این پدیدهها را میتوان در سایر سیستمهای شبه یک بعدی که ساختار پیچشی دارند، یافت.

منابع

 Senthil, T. Symmetry-Protected Topological Phases of Quantum Matter. Annu. Rev. Conden. Matt. Phys. 2014, 6, 1–26.
 Pedro, R. P.; Paulose, J.; Souslov, A.; Dresselhaus, M.; Vitelli, V. Topological Protection

Can Arise from Thermal Fluctuations and Interactions. Phys. Rev. Lett. 2019, 122, 118001.

[3] Zygmunt, W.; Teich, E. G.; Anders, G. v.; Glotzer, S. C. Topological order in densely packed anisotropic colloids. Phys. Rev. E 2019, 100, 032608.

[4] Mughal, A.; Chan, H. K.; Weaire, D. Phyllotactic Description of Hard Sphere Packing in Cylindrical Channels. Phys. Rev. Lett. 2011, 106, 115704.

[5] Lohr, M. A.; Alsayed, A. M.; Chen, B. G.; Zhang, Z.; Kamien, R. D.; Yodh, A. G. Helical packings and phase transformations of soft spheres in cylinders. Phys. Rev. E 2010, 81, 040401.

[6] Yamchi, M. Z.; Bowles, R. K. Helical Defect Packings in a Quasi-One-Dimensional System of Cylindrically Confied Hard Spheres. Phys. Rev. Lett. 2015, 115, 025702.

[7] Mickelson, W.; Aloni, S.; Han, W.-Q.; Cumings, J.; Zettl, A. Packing C60 in Boron Nitride Nanotubes. Science 2003, 300, 467–469.

[8] Hu, Y.; Fu, L.; Charbonneau, P. Correlation lengths in quasi-one-dimensional systems via transfer matrices. Mol. Phys. 2018, 116, 3345–3354.

[9] Zarif, M., & Bowles, R. K. (2023). A topologically stabilized metastable fluid in a system of cylindrically confined hard spheres. arXiv preprint arXiv:2306.04134.



تجزیه و تحلیل توزیع حفره-الکترون برای اثر انتقال بار در کاتالیزور نوری کمپلکس آلی-فلزی نیکل

سارا فخرایی^{او*}

۱ و *- دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور تهران، ایران رایانامه: fakhraee@pnu.ac.ir

واژگان كليدى: كاتاليزور نورى، كمپلكس نيكل، توزيع چگالى الكترونى، انتقال حفره-الكترون، TDDFT

۱– مقدمه

در سال های اخیر، کمپلکسهای نیکل به شدت مورد استقبال گروههای تحقیقاتی در واکنشهای کاتالیز دوگانه نوری قرار گرفتهاند. کمپلکسهای نیکلی که دارای لیگاندهای مختلفی مانند bipyridyl و(BIA) وانشهای کاتالیز دوگانه نوری قرار عملکردهای کاتالیزوری قابلتوجهی در هر دو واکنشهای فتوشیمیایی و حرارتی دارند. اکثر مطالعات واکنشهای فوتوکاتالیستی کمپلکسهای نیکل بر روی آنهایی که حاوی لیگاندهای بیپیریدیل هستند متمرکز شده است. این مطالعات واکنشهای فوتوکاتالیستی سنتز و گزارش شده از یک کمپلکس نیکل حاوی لیگاندهای بیپریدیل هستند متمرکز شده است. این مطالعات واکنشهای و یردازد که از واکنش MIA با دیک کمپلکس نیکل حاوی BIA به عنوان یک کاتالیزور در تسهیل واکنشهای آلی چندجزئی میپردازد که از واکنش BIA با یک میلکس نیکل حاوی است [1]. در این تحقیق، ساختار الکترونی Ni(BIA)Br2 را با استفاده از روش تابعی چگالی وابسته به زمان (TDDFT) و مفاهیم انتقال در اربیتالهای حفره-الکترون بررسی خواهیم کرد تا به چگونگی و ماهیت انتقال بار الکترونی را در این ترکیب کاتالیزوری آلی-فلزی پی ببریم.

۲- روش محاسبات

کلیه محاسبات شامل بهینه سازی ساختار هندسی، محاسبه فرکانسهای ارتعاشی و در سطح محاسباتی تابعی چگالی B97/Def2SVP توسط برنامه Gaussian16 در حلال دی متیل فرمامید (DMF) انجام گردید. ساختار هندسی کمپلکس شکل ۱ مشاهده می شود. روش تابعی چگالی وابسته به زمان (TDDFT) برای محاسبه طیف جذبی UV/Vis و انتقالهای الکترونی به کار گرفته شد. برنامه Multiwfn Version3.8 جهت آنالیز تابع موج و نقشه توزیع حفره-الکترون به کار گرفته شد.



شکل ۱: ساختار هندسی بهینه شده مولکول Ni(BIA)Br2

۲- بحث و نتیجهگیری



شکل ۲: طیف UV-Vis و سطوح حفره/الکترون به همراه نمایش نقشه توزیع حفره–الکترون برای اجزای کمپلکس Ni(BIA)Br₂

با در نظر گرفتن سهم حفره و الکترون برای چهار قطعه کمپلکس و شاخصهای بزرگی طول انتقال بار D، وسعت همپوشانی حفره و الکترون r، میزان توزیع متوسط حفره و الکترون H، و شاخص درجه جدایی حفره و الکترون در جهت انتقال بار t در جفره و الکترون در جهت انتقال بار t در جدول ۱، ماهیت انتقال به عنوان انتقال انتقال $S_0 \to S_1$ از نوع لیگاند به لیگاند (LLCT) شناسایی شده است. انتقال در طول موجهای جدول ۱، ماهیت انتقال به عنوان انتقال $S_0 \to S_1$ از نوع لیگاند به لیگاند (ELCT) شناسایی شده است. انتقال در طول موجهای ۳۹۳ و ۴۰۹ شامل حرکت چگالی الکترون از حفره متمرکز بر روی اتمهای R به فلز نیکل است (به ترتیب با ۶۸.۹۶٪ و ۸۸.۵۰٪ سهم الکترون) از نوع لیگاند به طور کلی، تجزیه و تحلیل حفره-الکترون برای سهم الکترون) از نوع لیگاند به فلز نیکل است (به ترتیب با ۶۸.۹۶٪ و ۸۸.۵۰٪ میمهم الکترون) از نوع لیگاند به فلز نیکل است (به ترتیب با ۱۹۹۶٪ و ۸۸.۵۰٪ سهم الکترون) از نوع لیگاند به فلز نیکل است (به ترتیب با ۱۹۹۶٪ و ۸۸.۵۰٪ میمهم الکترون) از نوع لیگاند به فلز نیکل است (به ترتیب با ۱۹۹۶٪ و ۸۸.۵۰٪ سهم الکترون) از نوع لیگاند به فلز نیکل می مولکول از لیگاندها به فلز نیکل هستند.



جدول ۱: سهم قطعات Ni(BIA)Br2 در حفره و الكترون، همپوشانی حفره-الكترون، اختلاف الكترون-حفره (همه به درصد)، بزرگی انتقال بار (D)، وسعت همپوشانی حفره و الكترون (Sr)، توزیع متوسط حفره و الكترون (H)، درجه جدایی حفره و الكترون (t)، نوع انتقال بار.

Excitation	Fragment	Hole	Electron	Overlap	Diff.	D(Å)	<i>S_r</i> (a.u.)	H(Å)	<i>t</i> (Å)	Туре
$S_0 \rightarrow S_{10}$	BIA	8.13	50.42	20.24	42.29	1.82	0.58	2.40	0.23	СТ
	2(PhOMe)	3.05	8.56	5.11	5.52					
	Ni	33.39	34.87	34.12	1.84					
	2Br	55.22	3.98	14.83	-51.24					
$S_0 \rightarrow S_9$	BIA	44.38	74.58	57.53	30.2	0.328	0.71	3.00	-1.76	LE
	2(PhOMe)	22.02	10.42	15.15	-11.6					
	Ni	22.56	9.89	14.94	-12.67					
	2Br	7.78	2.53	4.43	-5.25					
$S_0 ightarrow S_8$	BIA	1.9	16.97	5.68	15.07	1.72	0.41	1.98	0.70	СТ
	2(PhOMe)	3.5	6.56	4.79	3.06					
	Ni	8.3	68.96	23.92	60.66					
	2Br	85.85	5.84	22.4	-80.01					
$S_0 \rightarrow S_7$	BIA	16.66	34.15	23.86	17.49	1.08	0.65	2.68	0.54	СТ
	2(PhOMe)	23.26	8.06	13.7	-15.2					
	Ni	18.02	50.88	30.28	32.86					
	2Br	39.42	4.85	13.82	-34.57					

منابع و مراجع

[1] Bashiri, M., Hosseini-Sarvari, M., Fakhraee, S., (**2024**), A new dual nickel/ferrocenyl-chalcone as photoredox catalyst along with DFT studies for the three-component domino performance, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, 451, 115494.

ساخت سل خورشیدی آلی بر پایه ترکیب ITIC:PCE10 و بررسی پایداری دمایی و نوری آن

دانيكاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

شاهین قاسم زاده^{۲٬۱}۰٬ کلاوز میرهولتز^۳ , دانیله فاتزی[†] , کوین شولر⁴

۱ و ۰ - کارشناسی ارشد، فوتوشیمی و مواد مولکولی، دانشکده شیمی ، دانشگاه بولونیا Shahin.ghasemzadeh@studio.unibo.it 2 - کارشناسی ارشد، فوتوشیمی و مواد مولکولی، دانشکده شیمی ، دانشگاه کلن Shahin.ghasemzadeh@smail.uni-koeln.de 3- استاد تمام ، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه کلن Klaus.meerholz@uni-koeln.de 4 - استادیار، شیمی، شیمی محاسباتی، دانشکده شیمی، دانشگاه بولونیا Daniele.fazzi@unibo.it

5 - دكترى، شيمى، شيمى فيزيك، دانشكده شيمى، دانشگاه كلن Kevin.schuller@uni-koeln.de

واژگان كليدى: سل خورشيدى آلى، انرژى تجديد پذير، پذيرنده الكترونى غير فولرنى، ITIC، PCE10 الكترونى

۱– مقدمه

سل های خورشیدی آلی بر پایه دریافت کننده های الکترونی غیر فلورنی (NFA) در مقایسه با انواع فلورنی ویژگی های جالب توجهی از خود بروز میدهند. از جمله جذب نور بسیار بالا، و پایداری نوری قابل توجه. در میان NFA ها، نوع A-D-A (دریافت کننده – اهدا کننده – دریافت کننده) ظرفیت قابل ملاحظه ای برای افزایش بازده سل های خورشیدی از خود نشان داده است. از این بین ITIC و مولکول های مشتق شده از آن در رده محبوب ترین NFA ها قرار دارند (2019). مواد NFA اگرچه کاندید جالب توجهی برای سل های آلی به شمار می آیند، ولی کاستی های قابل توجهی نیز دارند. برای نمونه، آن ها تحت تابش مستقیم نور، بسته به اتمسفر محل، به شدت تخریب میشوند. در شرایط محیطی نرمال، بیشترین تخریب این مواد به دلیل تخریب پلیمر اهدا کننده الکترون و یا اکسیداسیون نوری NFA ها میباشد. به علاوه، گرما نیز باعث تغییرات ساختاری و در نتیجه کاهش بازده سل های آلی میشود که علت آن را میتوان عوامل ترمودینامیکی باعث جدایی فاز های پلیمر و NFA موجود در لایه فعال دانست (Clarke et al., 2021).



شكل 1 : تصوير ميكروسكوپ الكتروني SEM از سطح مقطع سل a ،ITIC) پخت شده در دماي €150 (b) بدون پخت



2- روش کار

تمام سل های ساخته شده در این پژوهش، با ساختار معکوس (inverted) و با ترتیب زیر ساخته شده اند:

ITO/ZnO/ITIC:PCE10/MoO₃/Ag

شیشه پوشش داده شده با ایندیوم قلع اکسید (ITO)، ITIC و PCE10 به صورت تجاری تهیه شدند. نانو ذرات روی اکسید (ZnO) طی فرایند سل-ژل با استفاده از روی استات دی هیدرات و اتانول آمین به عنوان حلال سنتز شدند. ITIC و ITIC) و ZnO) طی فرایند سل-ژل با استفاده از روی استات دی هیدرات و اتانول آمین به عنوان حلال سنتز شدند. ITIC و ITIC و این (ZnO) طی فرایند سل-ژل با استفاده از روی استات دی هیدرات و اتانول آمین به عنوان حلال کلروبنزن با نسبت (ZnO) مدت I د می در این و پلیمر اهدا کننده الکترون) در حلال کلروبنزن با نسبت I:1 به PCE10 (د. محمد تر محمد این به عنوان پذیرنده غیر فلورنی الکترون و پلیمر اهدا کننده الکترون) در حلال کلروبنزن با نسبت I:1 به PCE10 مدت I شبانه روز مخلوط شده و با سرعت 2000 rpm روی لایه ZnO اسپین کوت شدند. لایه های اکسید مولیبدن (MoO3) و نقره (Ag) نیز با استفاده از روش بخار گرمایی (MoOa) به ترتیب با ضخامت های 10 و 150 نانومتر لایه نشانی شدند. در نهایت تست های نوری و الکتروشیمیایی با دستگاه های مربوطه انجام شد. شایان ذکر است تمامی مانومل انجام شده در اتمسفر نیتروژن انجام گرفته است.

۳- بحث و نتیجه گیری

بیشترین بازده بدست آمده در این پژوهش مقدار %7.22 با پتانسیل مدار باز V 0.81 و جریان اتصال کوتاه 14.08 میشترین بازده بدست آمده در این پژوهش مقدار %7.22 با پتانسیل مدار باز V 2.3% و جریان اتصال کوتاه 14.08 مرما و پرتو MA/cm² بهمزمان، میتواند تا %2.3 بازده سل را کاهش دهد (جدول 1، شکل 2a). بعلاوه، از دیدگاه پایداری گرمایی، نتایج تست EQE به وضوح بیانگر تاثیر منفی فرایند پخت بر روی راندمان سل ها میباشد (شکل 2b).



شکل 2 : a) نمودار JV سل JTIC در حالت اولیه، تخریب، و پس از تخریب توسط گرمای C°150 و پرتو b، UV) منحنی بازده کوانتومی (External Quantum Efficiency) سل های ITIC پخت شده در C°150 و نشده، c) منحنی بیشینه توان (Maximum Power Point) سل های ITIC پخت شده در C°150 و نشده در طول 13 ساعت تابش نور 1 واحد خورشید.

در نهایت، با در نظر گرفتن بیشینه توان (MPP) میتوان نتیجه گرفت در شرایط آزمایشی 13 ساعته در پتانسیل بیشینه و تحت تابش شبیه ساز خورشیدی (معادل نور 1 خورشید)، سل های بدون پخت (همانند EQE) از پایداری بهتری برخوردار هستند (شکل 2c). نکته جالب توجه مقدار %0.2 بازیابی بازده طی استراحت و درصد کمتر تخریب طی تابش گرما وUV در



سل پخت شده میباشد. در انتها تغییرات مولکولی NFA ها توسط اسپکتروسکوپی جرمی (MS) و رزونانس مغناطیسی هسته ای (NMR) بررسی شد.

درصد بازده	Fill Factor	دانسيته جريان اتصال	پتانسیل مدار باز	حالت سل
(%PCE)		كوتاه	(V _{oc}) V	
		(J _{sc}) mA/cm ²		
7.22	0.63	14.08	0.81	اوليه (بدون پخت)
4.87	0.51	12.85	0.73	بعد از تابش گرما و یووی (بدون پخت)
4.85	0.51	12.82	0.73	بعد از ۳ شب استراحت (بدون پخت)
6.40	0.58	13.66	0.81	اوليه (با پخت)
5.25	0.55	12.89	0.74	بعد از تابش گرما و یووی (با پخت)
5.44	0.55	13.27	0.75	بعد از ۳ شب استراحت (با پخت)

جدول 1 : شاخص های الکتروشیمیایی سل ITIC در مراحل اولیه، تخریب، و پس از تخریب در دو حالت پخت شده و نشده

منابع و مراجع

- [1] Clarke, A. J., Luke, J., Meitzner, R., Wu, J., Wang, Y., Lee, H. K. H., Speller, E. M., Bristow, H., Cha, H., Newman, M. J., Hooper, K., Evans, A., Gao, F., Hoppe, H., McCulloch, I., Schubert, U. S., Watson, T. M., Durrant, J. R., Tsoi, W. C., Kim, J. S., & Li, Z. (2021). Non-fullerene acceptor photostability and its impact on organic solar cell lifetime. *Cell Reports Physical Science*, 2(7).
- [2] Du, X., Heumueller, T., Gruber, W., Classen, A., Unruh, T., Li, N., & Brabec, C. J. (2019). Efficient Polymer Solar Cells Based on Non-fullerene Acceptors with Potential Device Lifetime Approaching 10 Years. *Joule*, 3(1), 215– 226.



مطالعه ديناميك كوانتومى جفت شدگى قوى تحت ميدان كاواك پلاسمونى

کیمیا کارگر^{(ر*}، زهرا جمشیدی^۲

ا و ۱- نویسنده مسئول: دانشجو، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شریف (kimiakargar2828@gmail.com) ۲- دانشیار، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شریف (njamshidi@sharif.edu)

واژگان كليدى: پلاريتون، حسگرهاى كوانتومى، ديناميك كوانتومى، كاواك نانوپلاسمونى

۱– مقدمه

نانوذرات پلاسمونی با میدان الکترومغناطیسی کوانتیده زیرموج، بستر مفیدی برای دستیابی به رژیم جفت شدگی قوی بین نور و ماده میباشند. اخیرا ویژگی های نوری منحصر به فرد این ترکیبات زمینه کاربرد در حوزه تکنولوژی های کوانتومی را فراهم کرده است. کاواک نانوپلاسمونی میتواند تحت شرایط خاص با یک یا چند مولکول جفت شدگی قوی داشته و حالتهای پلاریتونی نور- ماده که هیبریدی از سطوح انرژی ماده و نور میباشد را در دمای اتاق ایجاد کند.(2022,Fregoni) این سطوح جدید با فراهم کردن امکان انتقال انرژی و بار بین سطوح مختلف ماده و نور بستری مناسب برای مهندسی مسیر واکنش میشوند. در این تحقیق با هدف بررسی خواص فتوفیزیکی و انتقالات الکترونی مولکول پیرازین و ۱و۶ دی فنیل ۱و۳ بوتادی ان تحت تاثیر کاواک پلاسمونی نقره، مدل هامیلتونین هرمیتی برای کاواک نانوپلاسمونی با تعداد ۲۰ اتم نقره طراحی شده است. این محاسبات در چارچوب دینامیک کوانتومی با رویکرد هارتری وابسته به زمان چند پیکربندی (MCTDH) انجام گرفته محاسبات در چارچوب دینامیک کوانتومی با رویکرد هارتری وابسته به زمان چند پیکربندی (MCTDH) انجام گرفته است.(Beck) پارامترهای مورد نیاز هامیلتونین به کمک محاسبات کوانتومی آغازین باز تولید شده است. در نهایت تاثیر قدرت جفت شدگی کاواک نقره با مولکول پیرازین بر میزان انتقالات فروپاشی غیرتابشی و طیف الکترونی پیرازین مورد ارزیابی قدرت میترد.

۲- روش

هامیلتونی الکترونی ارتعاشی شامل جملات مرتبه اول و دوم در ارتباط با مدهای ارتعاشی و سطوح مختلف الکترونی است که به شکل ترکیبی از هامیلتونی پایه و اثرات جفتشدگی الکترونی ارتعاشی توصیف می شود. به طور کلی، این هامیلتونی با اضافه کردن جملات جفتشدگی برای انتقالات الکترونی بین حالتهای مختلف انرژی و جملات مربوط به مدهای ارتعاشی مولکول تعریف شده است.(2023,Jamshidi) ارتعاشات و تغییرات مدها حول سطوح مختلف انرژی الکترونی توصیف می شود و برهم کنش بین ارتعاشات و حالتهای الکترونی در این چارچوب مورد بررسی قرار می گیرد.

(1)

$$\begin{aligned} \hat{H}_{Pl} &= \sum_{\alpha=1}^{F} \frac{\hbar \omega_{\alpha}}{2} \left(\hat{P}_{\alpha}^{2} + \hat{Q}_{\alpha}^{2} \right) 1 + \sum_{n=1}^{N} E_{n} |n \rangle < n| \\ &\sum_{\alpha,n=1}^{F,N} \kappa_{\alpha}^{(n)} Q_{\alpha} |n \rangle < n| + \sum_{\alpha,n,m=1}^{F,N} \lambda_{\alpha}^{(n,m)} Q_{\alpha} |n \rangle < m| \end{aligned}$$

در معادله (۱) ω_{α} فرکانس ارتعاشی و \hat{Q}_{α} نرمال مد ارتعاشی بوده و n و m سطوح برانگیخته مورد نظر می باشند. همچنین پارامتر E_{α} در این عبارت نشان دهنده انرژی های برانگیختگی سیستم بوده و دو پارامتر κ_{α}^{n} و λ_{α}^{nm} جفت شدگی درون سطوحی و بین سطوحی می باشند که به ترتیب عناصر قطری و غیرقطری ماتریس هامیلتونی را تشکیل می دهند.

داسگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳

۳- بحث

در پژوهش حاضر، دو مولکول پیرازین و ۱و۴ دی فنیل ۱و۳ بوتادی ان (DPB) در کنار کلاستر ۲۰تایی نقره قرار گرفته و تاثیر تغییر جهت گیری و فاصله بر روی جفت شدگی کاواک نانوپلاسمونی و مولکول مورد بررسی قرار گرفته است. ساختار سیستم های مورد مطالعه در شکل ۱ نمایش داده شده است.



شکل ۱: نحوه قرارگیری دو مولکول پیرازین و ۱و۴ دی فنیل ۱و۳ بوتادی ان در کنار کلاستر ۲۰ تایی نقره

جهت پیشبرد محاسبات دینامیک کوانتومی بر روی نانوذره فلزی با هدف باز تولید طیف TD-DFT و بررسی دینامیک سطوح برانگیخته فلزی نرم افزارMCTDH استفاده شده است. با توجه به نتایج بدست آمده در حالتی که مولکول DPB تحت زاویه ۹۰درجه نسبت به کاواک نانوپلاسمونی قرار گیرد، برهمکنشی ایجاد نشده و در طیف مربوطه تنها یک پیک ظاهر می شود که مربوط به مولکول است. همچنین نتایج مربوط به طیف مولکول پیرازین در فواصل مختلف نسبت به کلاستر فلزی در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲: طیف حاصل از دو مولکول پیرازین و ۴و۴ دی فنیل ۴و۳ بوتادی ان در کنار کلاستر ۲۰ تایی نقره

۴- نتیجه گیری

در این کار با هدف بررسی مدل هامیلتونی پیشنهادی و نیز مطالعه ماهیت کاواک نانوپلاسمونی، با در نظر گرفتن میرایی یا نشتی کاواک نانوپلاسمونی، محاسبات دینامیک کوانتومی با روش MCTDH مورد بررسی قرار گرفت. همچنین به کمک مدل هامیلتونی پیشنهادی ویژگی غیرتابشی بودن مولکول پیرازین و دینامیک انتقال بار تحت تاثیر کاواک نانوپلاسمونی بررسی شد.

منابع و مراجع

- Fregoni, J., Garcia-Vidal, F. J., & Feist, J. (2022). Theoretical Challenges in Polaritonic Chemistry. ACS Photonics. 9(4), 1096-1107.
- [2] Beck, M. H., Jäckle, A., Worth, G.A., & Meyer, H.-D. (2000). The multiconfiguration time-dependent Hartree (MCTDH) method: a highly efficient algorithm for propagating wavepackets. Physics Reports. 324(1), 1-105.
- [3] Jamshidi, Z., Kargar, K., Mendive-Tapia, D., & Vendrell, O. (2023). Coupling Molecular Systems with Plasmonic Nanocavities: A Quantum Dynamics Approach. J. Phys. Chem. Lett. 14(50), 11367-11375.



اغازین بررسی کردند (۱).

۲- روش و جزئیات محاسباتی

واکنش C2 با H2 با استفاده از نرمافزار گوسین ۹۰ و بهینهسازی نقاط ایستاده در سطح MP2/6-311++G(d,p) و محاسبات (CCSD(T) بررسی شده است (شکل ۱). سطح انرژی پتانسیل (PES) با ۱۶۶۴ نقطه داده ایجاد شد. ۱۵۰۰ مسیر در تعیین احتمال واکنش با انرژیهای مختلف تحلیل شدند و حداکثر پارامتر برخورد و جدایی اولیه بین واکنشدهندهها به ترتیب روی ۲/۶ و ۲/۲ بوهر تنظیم شد. نتایج احتمال واکنش برای این برخوردها در شکل ۲ ارائه شده است.



۳-محاسبه احتمال و سطح مقطع واکنش و ثابت سرعت

احتمال و اکنش تأثیر می گذارد. تغییرات این مقادیر در انرژی ۳۸.۶۶۲ کیلوژول بر مول بررسی شده است (شکلهای ۳و۴).. احتمال واکنش تأثیر می گذارد. تغییرات این مقادیر در انرژی ۳۸.۶۶۲ کیلوژول بر مول بررسی شده است (شکلهای ۳و۴).. سطح مقطع واکنش نشاندهنده منطقه برخورد مؤثر مولکولها برای واکنش است و با احتمال مرتبط میباشد. در نهایت، سرعت واکنش (شکل ۵) و پارامترهای مربوط به آن (معادلههای ۳–۱) با استفاده از روش فیت کردن حداقل مربعات غیرخطی برای واکنشهای ۲٫۵ مار ۲٫۵ مار ۲٫۹ و ۲٫۱ محاسبه میشود (جدول ۱). تفاوتهای سرعت واکنشها به جایگزینی ایزوتوپی در نوع، موقعیت و تعداد اتمها مرتبط است. به طور کلی، جایگزینی ایزوتوپی سنگینتر و نزدیکتر به جهت واکنش باعث افزایش سرعت میشود، در حالی که جایگزینی همزمان دو اتم با ایزوتوپها معمولاً آن را کاهش میدهد. براساس شکل ۵، توافق خوبی بین سرعت واکنش محاسبه شده و تجربی (۴) در دمای ۲۵۸۰ تا ۴۶۵۰ کلوین وجود دارد و نتایج این مطالعه توافق بهتری نسبت به دادههای محاسباتی دیگر (۵) با مقادیر تجربی نشان میدهد.

$$k(T) = \begin{bmatrix} \frac{8}{-4^{1/2} \tau^3} \end{bmatrix}_{E_{\sigma}(E) \exp(E/k_{\rm B}T) dE}^{-(1)} \qquad \sigma(E) = aE^{\gamma}, \gamma > -2 \qquad (\Upsilon) \qquad k(T) = a \left(\frac{8}{\pi t_{\mu}}\right)^{\frac{1}{2}} \Gamma(\gamma + 2) (k_{\rm B}T)^{\gamma + 1/2} \qquad (\Upsilon)$$



۴- نتیجهگیری

یک PES درونیابی دقیق برای توصیف دینامیک واکنش $C_2 + H_2$ و ایزوتوپهای آن ساخته شده است. محاسبات کلاسیک نشان میدهند که سرعت واکنشها بسته به جرم و جهت گیری ایزوتوپها متفاوت است، به طوری که گونههای سنگین تر واکنش سریعتری دارند: $R_{14} < R_{1} < R_{5} < R_{10} < R_{18}$

منابع و مراجع

Draine, B. T. (2011). Physics of the Interstellar and Intergalactic Medium. Princeton University Press.
 Fereidoonpour, P., & Ramazani, S. (2023). Collision of C₂ with NH and deuterated analogs in the interstellar medium: Scattering calculations. *Molecular Physics*, 121(6), 850-864.

[3] Kruse, T., & Roth, P. J. (1997). Physical Chemistry A, 101, 2138.

[4] Zhang, X., Ding Y., Li, Z., Huang, X., & Sun, C. (2000) Chemical Physics Letter, 330 577.

[5] Ischtwan, J., & Collins, M. A. (1994). Molecular Potential Energy Surfaces by Interpolation. Chemical Physics, 100(11), 8080–8088.



شبیهسازی مولکولی فر آیند انحلال سلولز در مایع یونی ۱–اتیل–۳–متیل ایمیدازولیوم استات و مقایسه آن با محیط آبی

سید محمد ترابی^۱، محمدحسین کوثری^{۲، *}

^۱ دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، mohammad.torabi@iasbs.ac.ir mhkowsari@iasbs.ac.ir دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان،

واژگان کلیدی: انحلال سلولز، مایع یونی، پیوند هیدروژنی، شبیهسازی دینامیک مولکولی

۱– مقدمه

زیست وده سلولزی فراوان ترین ماده خام تجدیدپذیر روی زمین و دارای ارزش افزوده زیاد است. ۴۰ میلیارد تن سلولز در سال تولید میشود؛ اما تنها ۰/۱ میلیارد تن از آن در صنعت مصرف میشود. سلولز یک پلیساکارید خطی متشکل از واحدهای D-گلوکز است که با پیوندهای گلیکوزیدی بتا(۱–۴) به هم متصل شدهاند. شکل طبیعی سلولز، ساختاری میکروفیبریلی است که در آن زنجیرهها موازی یکدیگر قرار می گیرند و صفحههای صاف را تشکیل میدهند و صفحهها کنار یکدیگر قرار می گیرند تا ساختار بلوري سه بعدي با دامنهي وسيعي از قطرها (۲–۲۰ نانومتر) و طولها (۱/۰ تا ۱۰۰ ميليمتر) را تشكيل دهند. ساختار بلوري سلولز داراي شبكهي پيوند هيدروژني پيچيده است. پيوندهاي هيدروژني بين گروههاي هيدروكسيلي مجاور در يک زنجير (درون زنجیرهای) و زنجیرههای مجاور (بین زنجیرهای) تشکیل میشوند. علاوه بر این برهم کنش های واندروالس، گلوکزها را روی صفحههای مجاور (بالا و پایین) کنار هم نگه میدارد که منجر به استحکام بلور سلولز می شود. برهم کنش های درون زنجیرهای، بین زنجیرهای و بین صفحهها، استحکام کافی را در برابر ساختارشکنها فراهم میکند و در نتیجه سلولز در آب و یا سایر حلالهای معمول، نامحلول است. انحلال یک گام پیش تصفیه مهم برای غلبه بر مقاومت سلولز قبل از تبدیل شدن آن به موادی با ارزش افزوده است. حلالهای مرسوم آبی و غیر آبی برای انحلال سلولز دارای معایبی مانند سمیت، تولید گازهای سمی، بازیافت ضعیف حلال و قابلیت انحلال ناکافی هستند. بنابراین تقاضای فزایندهای برای توسعه حلالهای سبز جایگزین برای غلبه بر این نقصها وجود دارد. در سال ۲۰۰۲ سواتلوسکی گزارش کرد که سلولز میتواند در مایع یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم کلرید حل شود. از آن زمان کاربردهای مایعات یونی در پیش تصفیه سلولزی در حال توسعه است. درک اینکه چرا مایعات یونی میتوانند سلولز را حل کنند برای طراحی مایعات یونی کارآمدتر و زیستسازگارتر و همچنین بهینهسازی فنآوریهای پیش تصفیه ضروری است. بنابراین تعداد زیادی پژوهش برای کسب دانش از سازوکار انحلال سلولز در مایع یونی انجام شده است (Szabó)، ۲۰۲۳، یا این حال موارد متعددی مانند نقش کاتیون، سهم برهم کنش آب گریز و جزییات فرآیند انحلال در سطح مولکولی نامشخص و بحثبرانگیز است.

۲- روش

از شبیهسازی دینامیک مولکولی برای بررسی اثر مایع یونی ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم استات ([Ac][MIM]] بر روی انحلال سلولز استفاده شده است. برای تهیهی ساختار اولیه دسته سلولز از اطلاعات بلورنگاری استفاده شد. هر دسته سلولز شامل ۸ زنجیر و هر زنجیر مرکب از ۸ واحد گلوکز است. تعداد واحدهای گلوکز در هر زنجیر (درجه پلیمریزاسیون) تعیین کننده میزان انحلال سلولز است. جعبه اولیه شبیهسازی با قرار دادن دسته سلولز در مرکز جعبه و حلال پوشی آن با ۲۰۰۰ جفت یون مایع یونی ساخته شد. برای مقایسه نتایج حاصل از سامانه سلولز – مایع یونی، شبیهسازی سلولز با آب خالص نیز انجام شد. برای توصیف برهمکنشهای بین اجزا، از میدان نیروی GLYCAM06 برای سلولز، GAFF برای مایع یونی و مدل TIP3P برای آب استفاده شد. پس از به تعادل رسانی سامانه، اجرای اصلی در مجموعه همدما-همفشار در دمای ۲۰۰۰ کلوین و فشار ۱ بار به

دانسکاه اصفیان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

۳- بحث و نتیجهگیری

یکی از مهمترین کمیتهایی که میتوان برای بررسی تغییر ساختار سلولز در حلال اندازه گیری کرد، ریشه میانگین مربع انحراف (RMSD) اتمهای سلولز است. منحنی RMSD سلولز بیشترین افت و خیز و افزایش را در حضور مایع یونی نشان میدهد، در صورتی که RMSD سلولز در حضور آب، فاقد افت و خیز محسوس بوده که نشان از پایداری سلولز در آب دارد. شعاع ژیراسیون (RG) سلولز نیز برای محاسبه میزان فشردگی ساختار سلولز بررسی شد. افزایش شعاع ژیراسیون در طول شبیه ازی سلولز در مایع یونی نشان از متورم شدن دسته سلولز دارد. سلولز در آب ساختار یکپارچه خود را حفظ می کند. سطح شریه سازی سلولز در مایع یونی نشان از متورم شدن دسته سلولز دارد. سلولز در آب ساختار یکپارچه خود را حفظ می کند. سطح میه میلولز افزایش یافته و از ۵۰ به ۲۵ نانومتر مربع افزایش مییابد که نشان از انحلال سلولز در مایع یونی دارد. برای در ک شهودی بهتر از تغییرات ساختاری سلولز در حلال، تصویر نهایی سلولز پس از ۲۰۰ نانوثانیه شبیه سازی در مایع یونی دارد. برای درک شده است. ساختار منسجم سلولز در حضور مایع یونی گسسته شده و زنجیرهای سلولز در مایع یونی پخش میشوند. در مقابل شده است. ساختار منسجم سلولز در حلال، تصویر نهایی سلولز پس از ۲۰۰ نانوثانیه شبیه سازی در مایع یونی دارد. برای درک در آب ساختار سلولز دستخوش تغییر چندانی نمی شود. سلولز به دلیل وزن مولکولی بالا و وجود شبکه پیوند هدروژنی درون و بین مولکولی قوی با حوزههای بلوری بسیار مرتب، حلالیت کمی در حلالهای رایج دارد. در این کار با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی توانایی بالای مایع یونی [ACI]



شکل ۱ : روند تغییر ریشه میانگین مربع انحراف (RMSD)، شعاع ژیراسیون (RG) و سطح در دسترس حلال (SASA) حاصل از شبیه سازی سلولز در محیط مایع یونی و محیط آبی. تصویر گرافیکی نهایی دسته سلولز حل نشده در آب و محلول در مایع یونی نیز نشان داده شده است.

منابع و مراجع

[1] Szabó, L., Milotskyi, R., Sharma, G., Takahashi, K. (**2023**). Cellulose processing in ionic liquids from a materials science perspective: turning a versatile biopolymer into the cornerstone of our sustainable future. Green Chem., 25, 5338-5389.

[2] Zhang, J., Wu, J., Yu, J., Zhang, X., Hea, J., Zhang J. (2017). Application of ionic liquids for dissolving cellulose and fabricating cellulose-based materials: state of the art and future trends. Mater. Chem. Front., 1, 1273-1290.



با دامه بندی کینوزان بر اساس قواعد موجود از ساختار ۲۱ اسی به ساختار ۲۷ دامه ای رسیدیم (.مرینک ۲۰۰۲، لوپز ۲۰۰۲، پریول ۲۰۱۳، سوزا ۲۰۲۱) (شکل–۱). و پرونجای توپولوژی اولیه نوشته شد. برای حدس اولیهی پارامترهای پیوندی از توابع توزیع پیوندها، زوایا و زوایای دووجهی که از آنالیز شبیهسازی تمام اتمی برای مراکز ژئومتری دانهها بدست آمده بود، بهره بردیم.

۲-۳ شبیهسازی دانهدرشت

با داشتن پرونجای توپولوژی اولیه ، ساختار دانه درشت در جعبهای مکعبی با ابعاد ۵.۴nm و ۳۰۵ دانهی آب از نوع W قرار گرفت و مانند شبیهسازی تمام اتمی مراحل حداقلرسانی انرژی، تعادل رسانی و انجام شبیهسازی انجام گرفت و توابع توزیع پیوندها، زوایا و زوایای دووجهی برای ساختار دانه درشت بدست آمد و نمودارهای مربوطه در کنار نمودارهای معادل حاصل از شبیهسازی تمام اتمی رسم شد و از میزان انطباق این نمودارها در مرحلهی بعد پرونجای توپولوژی اصلاح گریدید و مجددا شبیهسازی روی ساختار دانه درشت انجام گرفت و این روند تا حصول بیشترین انطباق بین نتایج حاصل از شبیهسازی تمام اتمی و دانهدرشت انجام گرفت.

کاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ یان ۱۴۰۳

۳- نتیجهگری

نمودارهای شکل-۲، توابع توزیع طول پیوند بین دانهها (رنگ قرمز) تطابق یسیار خوبی با توزیع تمام اتمی(رنگ آبی) دارد. که حاکی از انتخاب مناسب پارامترهای میدان نیرو است. لازم به ذکر است، سه نمودار فوق مربوط به سه پیوند بین ساختارهای مثلثی در مدل می باشد و این تنها ۳ نمودار از ۱۵ نمودار توابع توزیع پیوند است. برای زوایا و زوایای دووجهی نیز این نمودارها رسم شده اند. همچنین سطح قابل دسترس حلال در مدل دانهدرشت و ساختار تمام اتمی تطابق بسیار خوبی را نشان دادند.



شکل–۱ سمت چپ: نحوهی دانه بندی تترامر کیتوزان. سمت راست: ساختار دانه درشت کیتوزان و نوع هر دانه.



شکل-۲ نمودار توابع توزیع طول پیوند در طول شبیهسازی. رنگ قرمز و آبی به ترتیب شبیهسازی تمام اتمی و دانه درشت.

منابع و مراجع

[1]Marrink, Siewert J, Risselada, H Jelger, Yefimov, Serge, Tieleman, D Peter, and De Vries, Alex H. The martini force field: coarse grained model for biomolecular simulations. The journal of physical chemistry B, 111(27):7812–7824, 2007.

[Y]López, Cesar A, Rzepiela, Andrzej J, de Vries, Alex H, Dijkhuizen, Lubbert, Hünenberger, Philippe H, and Marrink, Siewert J. Martini coarse-grained force field: extension to carbohydrates. Journal of Chemical Theory and Computation, 5(12):3195–3210, 2009.

[r]Periole, Xavier and Marrink, Siewert-Jan. The martini coarse-grained force field. Biomolecular simulations: Methods and protocols, pp. 533–565, 2013.

[*]Souza,PauloCT,Alessandri, Riccardo, Barnoud, Jonathan, Thallmair, Sebastian, Faustino, Ignacio, Grünewald, Fabian, Patmanidis, Ilias, Abdizadeh, Haleh, Bruininks, Bart MH, Wassenaar, Tsjerk A, et al. Martini 3: a general purpose force field for coarse-grained molecular dynamics. Nature methods, 18(4):382–388, 2021.



بررسی اثر دما و طول زنجیر آلکیلی کاتیون بر رفتار تعادل فاز مایع-مایع سیستمهای سهتایی آبی پلیپروپیلن *گ*لیکول - نمک تتراآلکیل آمونیوم هالید

نهال نصرت پور^۱، نوسیبه ابراهیمی^{۲و*،} رحمت صادقی^{۳و*}.

۱ - دانشجوی کارشناسی ارشد شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، nahalnpr632@gmail.com ۲- نویسنده مسئول: استادیار شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، rsadeghi@uok.ac.ir ۳- نویسنده مسئول: استاد شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، rsadeghi@uok.ac.ir

واژگان كليدى: سيستم دوفازى آبى، نمكزدايى، پليمر، تتراآلكيل آمونيوم هاليد

۱– مقدمه

اخیرا طراحی تکنولوژیهای جداسازی سبز بسیار مورد توجه محققان قرار گرفته است. از طرفی روشهای سنتی و قدیمی استخراج مایع-مایع، به واسطه مخاطرات زیستمحیطی ناشی از فراریت، اشتعال پذیری و سمیت حلالهای آلی به کار رفته کمتر مورد استفاده قرار می گیرد. در سالهای اخیر، سیستمهای دو فازی آبی (ATPS) که سهم عمده هر دو فاز از آب تشکیل شده، بهعنوان بستری برای استخراج مایع-مایع در جداسازی، تصفیه و تغلیظ مواد زیستی، دارویی، خوراکی و شیمیایی مورد توجه پژوهشگران واقع شدهاند [۱]. دو فاز آبی در حال تعادل در ATPS خواص فیزیکی و شیمیایی متفاوتی دارند، از اینرو بستری را برای توزیع نابرابر مواد مختلف فراهم میکنند [۲]. بدون دانش کافی از رفتار تعادل فاز مایع-مایع و عوامل مختلف کنترل کنندهی آن، طراحی بهینه فرآیند استخراج مایع-مایع میتی بر ATPS، غیرممکن است. در این پژوهش، اثر عوامل مختلف بر تعادل فاز SATPSهای متشکل از پلیمر پلیپروپیلن گلیکول (PPG) و نمک چهارتایی آمونیوم بررسی میشود.

۲- مواد و روش کار

۲-۱- مواد مورد استفاده

نمکهای تترا متیل آمونیوم برماید (TMAB) و تترا اتیل آمونیوم برماید (TEAB)، و پلیمر پلیپروپیلنگلیکول (PPG) از شرکت مرک خریداری شد. آب دو بار تقطیر در تهیهی محلولها استفاده شد.

۲-۲- روش تعیین نمودار فاز مایع -مایع (منحنی باینودال)

محلول آبی نمکهای چهارتایی آمونیوم با کسر وزنیهای مشخص تهیه شد. پس از اتصال ترموستات به جداره بیرونی سل باینودال و تنظیم دمای محلول، مقدار توزین شـده از محلول آبی نمک آمونیومی به جداره داخلی سـل تزریق شـد. سـپس در من المراجع الم المراجع المراجع

دمای ثابت و تحت همزدن مداوم، تزریق قطرهوار PPG خالص به محلول آبی نمک انجام شـد تا زمانی که یک مخلوط کدر (دو فازی) ظاهر شود. پس از آن، آب خالص تزریق شد تا مخلوط شفاف شود (تک فازی).

۳- نتايج و بحث

اثر دما بر منحنی باینودال سیستمهای سهجزئی آب + TMAB + PPG400 و آب + TEAB + PPG400 به ترتیب در شکلهای ۱ و ۲ آورده شده است. مشاهده می شود که پتانسیل دوفازی شدن با افزایش دما بیشتر می شود. علت این مسئله آب گریزتر شدن PPG در دماهای بالاتر است. شکل ۳ اهمیت طول زنجیر آلکیلی کاتیون نمک در قدرت نمکزدایی و پتانسیل تشکیل ATPS را نشان می دهد. با مقایسه ی منحنی باینودال سیستمهای آب + TMAB + PPG400 و آب + PPG400 PPG400 + TEAB مشخص می شود که کاهش طول زنجیر هیدروکربنی کاتیون منجر به گسترش ناحیه ی دوفازی می شود.



شکل ۱: نمودار اثر دما بر منحنی باینودال سیستم سه تایی آب + TMAB + PPG400.



شكل ۲: نمودار اثر دما بر منحنى باينودال سيستم سهتايي آب + TEAB + PPG400.







بررسی نظری برهمکنش داروی ۲-تیواوراسیل با نانومخروط بورنیترید

فاطمه آبگون '، داود فرمانزاده ٔ

۱ – دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمیفیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران، (naghme.abgoon@gmail.com) ۲–استاد، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، گروه شیمیفیزیک، دانشکده شیمی،دانشگاه مازندران، (d.farmanzad@umz.ac.ir)

واژگان کلیدی: ۲-تیواوراسیل، نانو مخروط، دارورسانی، بور نیترید.

۱–مقدمه

۱-۱- نانومخروط بور نیترید

نانومخروطهای بورنیترید بهعنوان مواد نانوساختاری با خواص منحصربهفرد مانند زیست سازگاری، خواص نوری، افزایش انحلال پذیری دارو ، هدفگیری خاص و آزادسازی کنترلشده در دارورسانی مورد توجه قرار گرفتهاند. این ویژگیها، نانومخروطهای بورنیترید را به گزینهای جذاب برای سامانههای دارورسانی پیشرفته تبدیل کرده است [۱].

۲-۲- ۲- داروی تیواوراسیل

داروی ۲- تیواوراسیل یک داروی ضدتیروئیدی است که برای درمان پرکاری تیروئید و بیماری گریوز استفاده میشود. این دارو با مهار آنزیم تیروپراکسیداز، تولید هورمونهای تیروئیدی را کاهش میدهد. عوارض جانبی ممکن، شامل واکنشهای الرژیک، اختلالات کبدی و کاهش تعداد گلبولهای سفید خون است [۲].

۲-روش محاسباتی

(1)

 $E_{ads} = E_{drug_BN} - (E_{drug} + E_{BN})$

75



۳- بحث و نتیجه گیری

هدف از این پژوهش، بررسی برهم کنش (جذب) ۲-تیواوراسیل بهعنوان داروی ضد تیروئید با نانومخروط بورنیترید بهعنوان نانوحامل، برای افزایش فراهمی زیستی و پایداری این دارو است. در ابتدا، ساختار هر دو ترکیب ۲-تیواوراسیل و نانومخروط بورنیترید بهطور مچزا بهینهسازی شدند (شکل ۱). در مرحلهی بعد، مولکول دارو، در فاصلههای مختلف از نانومخروط و جهتهای مناسبی قرار داده شد و ساختار کمپلکس حاصل از نانومخروط و ۲-تیواوراسیل بهینهسازیشد. در هر مورد انرژی جذب ترکیب دارویی و نانومخروط با استفاده از رابطه ۱ محاسبه گردید. دامنهی انرژیهای جذب محاسبه شده برای ساختارهای کمپلکسهای حاصله از ۴۶/۶۷۸ – تا ۲۶۵/۴۸۷ – کیلوژول بر مول بهدست آمد. با توجه به انرژیهای جذب ارزیابی شده، مشخص گردید که جذب ترکیب دارویی ۲-تیواوراسیل، بر روی نانومخروط بورنیترید، از نوع شیمیایی میباشد. در شکل ۲، پایدارترین ساختار کمپلکس نانومخروط بور –زیترید با ۲-تیواوراسیل، که دارای بیشترین انرژی جذب میباشد، به نمایش گذاشته شده است.



شکل ۱ (الف) ساختار بهینهشده داروی ۲-تیواوراسیل، (ب) ساختار بهینهشده نانومخروط بور نیترید



شکل ۲ ساختار بهینهشده پایدارترین کمپلکس داروی ۲-تیواوراسیل و نانومخروط بور نیترید

منابع و مراجع

[1] Sun, Z.; Wang, S. Xiong, H.; Wu, K.; Shi, J. Optimal nanocone geometry for water flow. AIChE Journal, (2022), 68, e17543.

[2] Léger, J.; Delcour, C.; Carel, J.C. Fetal and neonatal thyroid dysfunction. The Journal of Clinical Endocrinology & Metabolism (2022)107, 836–846.

[3] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, Phys. Rev. Lett. 77



ویژگیهای مکانیکی و دمای انتقال شیشهایشدن چارچوب فلز-آلی پرشده با رزین اپوکسی: یک مطالعهی دینامیک مولکولی

ناهید فرضی کاهکش^۱، مائده ابراهیم نجف آبادی^۲

nfarzi @sci.ui.ac.ir، دانشگاه اصفهانnfarzi @sci.ui.ac.ir - دانشیار، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه ۲-کارشناسی ارشد، نانوشیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، maedeebrahimi1532@gmail.com

واژگان كليدى: بسپار EPON862- تتا، ZIF-8، ويژگىھاى مكانيكى، دماى انتقال شيشەاىشدن

۱– مقدمه

اپوکسی ها نوعی بسپار ترموست با ساختار شبکهای سه بعدی هستند که ویژگی های برتری از جمله استحکام بالا، انقباض کم (کلائوس، ۱۹۶۶) و مقاومت در برابر خوردگی را از خود نشان می دهند. افزودن پر کننده هایی مانند نانوذرات یا نانولوله ها به بسپارها می تواند به طور قابل توجهی، ویژگی های مکانیکی، حرارتی و الکتریکی بافت های بسپاری را افزایش دهد (گومول، ۱۹۹۹ و بالازس، ۲۰۰۶). به این دلیل که نسبت سطح به حجم بالای نانومواد منجربه برهم کنش صمیمی تر بین پر کننده و بسپار می شود و در نتیجه انتقال تنش بهتر بین دو قسمت انجام می شود (مکمانوس، ۲۰۰۲، شفر، ۱۹۹۰، وایا، ۲۰۰۱، مبهلا، ۲۰۰۳ و آیمونیر ۲۰۰۳). نانوذره های متخلخل دسته ای از نانوساختارها هستند که به دلیل منفذها یا کانال های در اندازه نانو دارای ویژگی های منحصربه فردی هستند که می توانند برای کاربرده ای مختلفی مانند ذخیره سازی گازها(کپلر، ۲۰۰۹)، جداسازی (گوییهن، ۲۰۰۳) و کاتالیست (اومورا، ۲۰۰۹) مورد استفاده قرار گیرند. در میان نانوذره های متخلخل، چارچوب های فلز آلی دسته ای از مواد متخلخل هستند که از یون های فلزی و اتصال دهنده های آلی تشکیل شده اند (ژو، ۲۰۱۲، محمودی ۲۰۱۹ و محمودی، ۲۰۲۰). زئولیت ایمیدازولات –۸ (SIF) دسته ای از چارچوب های فلز آلی است که به دلیل منفزه یا کانال مای در انداز م محمودی، ۲۰۰۲). زئولیت ایمیدازولات –۸ (SIF) دسته ای از چارچوب های فلز آلی است که به دلیل داشتن ساختار متخلخل و سطح داخلی بزرگ به عنوان یک کاندید عالی برای جذب گازها (لی، ۲۰۱۴)، جداسازی کربن دی اکسید (ژو، ۲۰۱۳)، فرآیندهای و سطح داخلی بزرگ به عنوان یک کاندید عالی برای جذب گازها (لی، ۲۰۱۴)، جداسازی کربن دی اکسید (ژو، ۲۰۱۳)، فرآینده ای

مطالعهی حاضر به بررسی ویژگیهای نانوکامپوزیت بسپاری به نام اپوکسی/ZIF-8 میپردازد و آن را با بسپار اپوکسی شبکهایشده خالص برای درک تأثیر نانوذرهها بر ساختار، مقایسه میکند. در این راستا، ابتدا ویژگیهای اپوکسی شبکهای شده خالص در دماهای مختلف و دو میدان نیروی متفاوت از طریق شبیهسازی دینامیک مولکولی با برنامه شبیهسازی مولکولی متریالز استودیو ۲۰۱۷ مورد مطالعه قرار گرفته است(بیوویا، ۲۰۱۷) و سپس نتایج با نتایج شبیهسازی نانوکامپوزیت اپوکسی/ZIF-8 مقایسه میشود. تأثیر اندازه نانوذره و دما نیز بر روی ویژگیهای بسپار اپوکسی شبکهایشده مورد بررسی قرار گرفت. به این منظور، در بخش دوم، دو زیرمجموعه، آمادهسازی مولکولی، نانوذرات و جعبه شبیهسازی، همراه با شرایط شبیهسازی برای بسپار اپوکسی شبکهایشده و نانوکامپوزیت توضیح داده میشود.



۲- روش

۲-۱- شبیهسازی دینامیک مولکولی بسپار اپوکسی شبکهای شده خالص:

بسپار شبکهای شده بین گروههایی از بسپار اپوکسی دی گلیسیدیل اتر بیسفنول⊣ف (EPON-862) و عامل پخت تری اتیلن تترا آمین(TETA) تشکیل می شود. شکل ۱ بسپار اپوکسی شبکهای شده مورد استفاده در این مطالعه را نشان می دهد.



شکل۱: بسپار اپوکسی شبکهای شده با نمایش توپ و چوب (چپ) و ساختار مولکولی (راست).

یک جعبه شبیه سازی حاوی ۶۷ عدد بسپار اپوکسی شبکه ای شده با استفاده از گزینه سلول آمورف نرم افزار متریالز استودیو ایجاد شد و با الگوریتم اسمارت در گزینه فورسایت آن بهینه سازی شد و برای متعادل کردن سامانه، مرحلهی باز پخت، برای بررسی حالت های مختلف انرژی و رسیدن به حالت تعادل حرارتی انجام شد. به طوری که دمای سامانه به تدریج از یک مقدار اولیه (معمولاً در صفر مطلق یا نزدیک به صفر مطلق) به یک مقدار دلخواه افزایش و سپس سامانه به دمای اولیه برمی گردد.

محاسبه دمای انتقال شیشهای شدن(Tg):

جعبه شبیه سازی خروجی از مرحلهی باز پخت در دو میدان نیرو COMPASS و UFF به مدت ۱ نانوثانیه در مجموعه NPT و با گام زمانی ۱ فمتوثانیه از دمای ۳۰۰ تا ۴۵۰ کلوین با بازه دمایی ۱۰ کلوین و در فشار ۱ اتمسفر به تعادل رسید. در این مرحله از ترموستات اندرسن و باروستات برندسن با زمان آسایش ۱ پیکوثانیه استفاده شد.

محاسبه ویژگیهای مکانیکی :

برای محاسبه ویژگیهای مکانیکی از روش کرنش ثابت استفاده شد. به این منظور تعداد مراحل برای هر کرنش و دامنه هر کرنش باید تعیین شود. در این مطالعه تعداد مراحل ۴ و حداکثر دامنه کرنش ۰/۰۰۳ در نظر گرفتهشد. برای تمام جعبههای شبیهسازی در این مطالعه، ۱۰ چارچوب خروجی نهایی برای محاسبه ویژگیهای مکانیکی استفاده شد. برای بررسی اثر دما بر روی ویژگیهای مکانیکی، مراحل فوق برای جعبههای شبیهسازی به تعادل رسیده در دماهای ۳۰۰، ۳۱۰، ۳۲۰، ۳۳۰، ۳۳۰



۲-۲- شبیهسازی دینامیک مولکولی نانو کامپوزیت اپوکسی / ZIF-8 : آمادهسازی جعبه شبیهسازی حاوی نانوکامپوزیت اپوکسی / ZIF-8 :

ابتدا با استفاده از دادههای کریستالوگرافی ساختار ZIF-8 با فرمت CIF در اندازه نانو و با ابعاد کریستالوگرافی ابتدا با استفاده از نرمافزار مرکوری تهیه شد. شکل ۲ سه نانوذره ۶۸-۹۲۴(۱×۱×۱)، Å³ (۱×۱×۱)، Å³ (۱×۱×۱)، Å³ میاه استفاده از نرمافزار مرکوری تهیه شد. شکل ۲ سه نانوذره 8-ZIF که در این مطالعه استفاده شده را نشان میدهد. در مرحلهی بعد سه جعبه شبیه سازی با استفاده از نرمافزار مرکوری تهیه شد. شکل ۲ سه متریالز استودیو تهیه شد. نانوذره 8-ZIF در مرکز جعبه و به ترتیب تعداد ۶۹، ۱۱۷ و ۲۰۰ عدد بسپار اپوکسی شبکهای شده متریالز استودیو تهیه شد. نانوذره 8-ZIF در مرکز جعبه و به ترتیب تعداد ۶۷، ۱۱۷ و ۲۰۰ عدد بسپار اپوکسی شبکهای شده اطراف نانوذره قرار داده شد به بازی با ۵۰۰ درصد وزنی المراف نانوذره در همهی جعبههای شبیه سازی ۹۰ به ۱۰ درصد وزنی با سرازی با ۱۰۰ می متریالز استودیو تهای شده میانوند مانوند ۵۰۰ می می متریالز استودیو تهیه شد. نانوذره ۱۰۵ که درصد وزنی اپوکسی به نانوذره در همهی جعبههای شبیه سازی ۹۰ به ۱۰ درصد وزنی با سرازی ۱۰۰ می متر می متر مکعب شد.

تعادلرسانی نانوکامپوزیت اپوکسی / ZIF-8 :

Tg به منظور بررسی تأثیر اندازه نانوذره ی ZIF-8 برروی ویژگیهای مکانیکی نانوکامپوزیت اپوکسی / ZIF-8 و محاسبه ی Tg تمام مراحل گفته شده در قسمت ۲-۱ بر روی جعبه های شبیه سازی انجام شد. در مرحله ی بعد بر روی جعبه های خروجی از مرحله ی باز پخت با استفاده از گزینه دینامیک قسمت فورسایت نرم افزار متریالز استودیو، شبیه سازی MPT به مدت ۱ نانوثانیه، دمای ۳۰۰ کلوین، فشار ۱ اتمسفر و گام زمانی ۱ فمتوثانیه تا رسیدن به چگالی تعادلی انجام شد. برای شبیه سازی سامانه حاوی نانوذره ZIF-8 تنها از میدان نیروی UFF استفاده شد چون میدان نیروی COMPASS اطلاعات مربوط به فلز روی در ساختار ZIF-8 را ندارد.



شکل۲: نانوذرههای استفادهشده در این مطالعه با ابعاد الف) ۴۹۲۴/۵۴Å³ ۹۸۴۹/۰۸ ج) ۹۸۴۹/۰۸

محاسبه Tg نانوكامپوزيت اپوكسي / ZIF-8 :

به منظور محاسبهی Tg نانوکامپوزیت اپوکسی ، جعبهی شبیهسازی حاوی ۶۷ عدد بسپار اپوکسی و نانوذره ZIF-8 با اندازه ۴۵ ۴۹۲۴ منا در ماهای ۳۰۰ تا ۲۵۰ کلوین و با فاصلهی دمایی ۱۰ کلوین تا رسیدن به چگالی تعادلی شبیهسازی شد.

محاسبه ویژگیهای مکانیکی نانوکامپوزیت اپوکسی / ZIF-8 :

بعد از به تعادل رسیدن سه جعبه شبیهسازی حاوی نانوذره ZIF-8، ویژگیهای مکانیکی با استفاده از نرمافزار متریالز استودیو و با روش کرنش ثابت در دماهای ۳۰۰، ۳۰۰،۳۲۰، ۳۳۵، ۳۴۵، ۳۴۰ و ۳۴۵ کلوین انجام و نتایج با یکدیگر مقایسه شد.

۳- بحث و نتیجهگیری

Te-۱- محاسبهی ویژگیهای مکانیکی و Tg بسپار اپوکسی شبکهای شده با استفاده از میدان نیروی UFF و COMPASS :

والسكار اصفيان ٢٩ و ٣٠ بالان ١٤٠٣

با بررسی نتایج حاصل از ویژگیهای مکانیکی و Tg بسپار اپوکسی شبکهای شده در دومیدان نیرو UFF وCOMPASS متوجه شدیم که میدان نیروی COMPASS در زمینهی شبیه سازی و محاسبه ویژگیهای مکانیکی بسپار اپوکسی به مراتب موفق تر عمل می کند زیرا نتایج شبیه سازی بسپار اپوکسی در میدان نیرو COMPASS با مقدار تجربی گزارش شده (۳۷۸ موفق تر عمل می کند زیرا نتایج شبیه سازی بسپار اپوکسی در میدان نیرو Tg در دو میدان نیرو برای بسپار اپوکسی شده (۳۷۸ مراوط به محاسبه ی Tg در دو میدان نیرو برای بسپار اپوکسی شده (۳۷۸ می کند زیرا نتایج شبیه سازی بسپار اپوکسی در میدان نیرو Tg محاسبه ویژگیهای مکانیکی بسپار اپوکسی شده (۳۷۸ موفق تر عمل می کند زیرا نتایج شبیه سازی بسپار اپوکسی در میدان نیرو Ty می می از تعلیم تعربی گزارش شده (۳۷۸ موفق تر عمل می کند زیرا نتایج شبیه سازی بسپار اپوکسی شده (۳۷۸ مراوط به محاسبه ی Tg در دو میدان نیرو برای بسپار اپوکسی شبکه ای شده در شکل ۳۰ نشان داده شده استان داد. نمودار مربوط به محاسبه ی Tg در دو میدان نیرو برای بسپار اپوکسی شبکه ای شده در شکل ۳۰ نشان داده شده استان داد. نمودار مربوط به محاسبه ی Tg در میدان نیرو برای بسپار اپوکسی شبکه ای شده در شکل ۳۰ نیرو برای بسپار اپوکسی شبکه ای شده در شکل ۳۰ نشان داده شده استان داد. نمودار مربوط به محاسبه محاسبه و Tg در دو میدان نیرو برای بسپار اپوکسی شبکه ای شده در شکل ۳۰ نشان داده شده است.

-۲-۳ ویژگیهای مکانیکی و Tg نانوکامپوزیت اپوکسی / ZIF-8:

دمای Tg برای نانوکامپوزیت اپوکسی/ SIF-8 در حدود ۴۴۵ کلوین محاسبه شد که نشان از بهبود دمای Tg در حضور نانوذره متخلخل SIF-8 داد. نتایج حاصل از شبیهسازی همچنین نشان میدهد که افزودن نانوذرهی ZIF-8 به بسپار اپوکسی ویژگیهای مکانیکی مثل مدول یانگ، بالک و برشی را افزایش میدهد که این نشان از مقاومت نانوکامپوزیت اپوکسی / ZIF-8 در دماهای مالا در مقایسه با بسپار اپوکسی / ZIF-8 در دماهای بالا در مقایسه با بسپار اپوکسی / ZIF-8 در دماه می دهد که این نشان می دهد که افزودن نانوذره یا ZIF-8 در حضور ویژگی مال مدول یانگ، بالک و برشی را افزایش میدهد که این نشان از مقاومت نانوکامپوزیت اپوکسی / Sig کسی / Sig که در دماهای بالا در مقایسه با بسپار اپوکسی خالص دارد که می تواند به دلیل برهمکنش موثر ZIF-8 و زنجیرههای اپوکسی باشد که در دماهای بالا باعث افزایش مقاومت و استحکام نانوکامپوزیت اپوکسی / ZIF-8 می شود.

۳-۳- تأثیر اندازه نانوذره ZIF-8 بر روی ویژگیهای مکانیکی نانوکامپوزیت اپوکسی / ZIF-8:

با بررسی نتایج ویژگیهای مکانیکی نانوکامپوزیتهای اپوکسی / ZIF-8 با ابعاد مختلف از ZIF-8 مشخص شد که افزودن ZIF-8 با ابعاد میانه ی ۹۸۴۹/۰۸ Å³ میتواند مدول یانگ و برشی بسپار اپوکسی شبکهای شده را در دمای ۳۰۰ کلوین به مقدار کمی نسبت به ZIF-8 با ابعاد دیگر بهبود بخشید. نسبت سطح به حجم نانوذرات با افزایش اندازهی آنها کاهش مییابد و این کاهش میتواند نتیجهی ضعیف شدن برهمکنش بین ZIF-8 و بسپار اپوکسی باشد.



شکل۳: محاسبهی چگالی برای بسپار اپوکسی شبکهایشده در میدان نیروی الف) UFF و ب) COMPASS محل Tg با نقطهچین آبی نشان دادهشدهاست.

[1] Klaus, I.S., & Knowles, W.S. (1966). Reduction of shrinkage in epoxy resins, J. Appl. Polym. Sci. 10 887-

منابع

[2] Gomoll, A.H., & Bellare, A., & Fitz W., & Thornhill, T.S., & Scott, R.D., & Jemian, P.R., & Long, G.G. (1999). A nano-composite poly (methyl-methacrylate) bone cement, MRS Online Proc. Libr. 581.

889.

[3] Balazs, A.C., & Emrick, T., & Russell, T.P. (2006). Nanoparticle polymer composites: where two small worlds meet, Science, 314, 1107-1110.

[4] Mcmanus, A., & Siegel, R., & Doremus, R., & Bizios, R. (2000). In vitro evaluation of novel polymer/ ceramic nanocomposites for orthopedic material applications, Ann. Biomed. Eng. 28, 15.

[5] Schaefer, D.W., & Mark, J., & McCarthy, D., & Jian, L., & Sun, C., & Farago, B. (1990). Polymer based molecular composites, Mat. Res. Soc. Symp.

[6] Vaia, R.A., & Giannelis, E.P. (2001). Polymer nanocomposites: status and opportunities, MRS Bull. 26, 394-401.

[7] Mbhele, Z., & Salemane, M., & Van Sittert, C., & Nedeljkovi'c, J., & Djokovi'c, V., & Luyt, A. (2003). Fabrication and characterization of silver-polyvinyl alcohol nanocomposites, Chem. Mater. 15, 5019-5024.

[8] Aymonier, C., & Bortzmeyer, D., & Thomann, R., & Mülhaupt, R. (2003). Poly (methyl methacrylate)/palladium nanocomposites: synthesis and characterization of the morphological, thermomechanical, and thermal properties, Chem. Mater. 15, 4874-4878.

[9] Li, J.-R., & Kuppler, R.J., & Zhou, H.-C. (2009). Selective gas adsorption and separation in metal-organic frameworks, Chem. Soc. Rev. 38, 1477-1504.

[10] Guihen, E., & Glennon, J.D. (2003). Nanoparticles in separation science-recent developments, Anal. Lett. 36, 3309–3336.

[11] Uemura, T., & Yanai, N., & Kitagawa, S. (2009). Polymerization reactions in porous coordination polymers, Chem. Soc. Rev. 38, 1228–1236.

[12] Zhou, H.-C., & Long, J.R., & Yaghi, O.M. (2012). Introduction to Metal-Organic Frameworks, ACS Publications, pp. 673–674.

[13] Mahmoodi, N.M., & Taghizadeh, M., & Taghizadeh, A., & Abdi, J., & Hayati, B., & Shekarchi, A.A. (2019). Bio-based magnetic metal-organic framework nanocomposite: ultrasound-assisted synthesis and pollutant (heavy metal and dye) removal from aqueous media, Appl. Surf. Sci. 480, 288-299.

[14] Mahmoodi, N.M., & Oveisi, M., & Taghizadeh, A., & Taghizadeh, M. (2020). Synthesis of pearl necklacelike ZIF-8(a) chitosan/PVA nanofiber with synergistic effect for recycling aqueous dye removal, Carbohydr. Polym. 227, 115364.

[15] Li, R., & Ren, X., & Feng, X., & Li, X., Hu, C., & Wang, B. (2014). A highly stable metal-and nitrogendoped nanocomposite derived from Zn/Ni-ZIF-8 capable of CO 2 capture and separation, Chem. Commun. 50, 6894-6897.

[16] Zhu, M., & Srinivas, D., & Bhogeswararao, S., & Ratnasamy, P., & Carreon, M.A. (2013). Catalytic activity of ZIF-8 in the synthesis of styrene carbonate from CO2 and styrene oxide, Catal. Commun. 32, 36-40.

[17] Wu, H., & Zhou, W., & Yildirim, T. (2007). Hydrogen storage in a prototypical zeolitic imidazolate framework-8, J. Am. Chem. Soc. 129 (2007) 5314-5315.

[18] Hu, Y., & Liu, Z., & Xu, J., & Huang, Y., & Song, Y. (2013). Evidence of pressure enhanced CO2 storage in ZIF-8 probed by FTIR spectroscopy, J. Am. Chem. Soc. 135, 9287-9290.

[19] Biovia, D.S. (2017). Discovery studio modeling environment, Release.



جذب و جداسازی اتان-اتیلن و پروپان-پروپیلن توسط چارچوبهای فلز-آلی سری همخانواده ZUL با استفاده از روش شبیهسازی

فاطمه ابراهیم زاده چاری'، سعید یگانگی^۲

 ۱- دانشجو کارشناسی ارشد، رشته شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران Email: <u>F.ebrahimzadeh7866@gmail.com</u>
 ۲- استاد دانشگاه مازندران، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران Email: <u>yeganegi@umz.ac.ir</u>

واژگان کلیدی: چارچوبهای فلز-آلی، جذب، جداسازی، الفین، پارافین

۱ – مقدمه

اتیلن و پروپیلن که جزو الفینها هستند، در صنعت پتروشیمی با روش کراکینگ با بخار آب تولید میشوند. در این فرآیند هیدروکربنهای گازی و مخلوطهای سبک هیدروکربنهای بزرگ به هیدروکربنهای کوچک شکسته میشوند و هیدروکربنهای حرارت داده میشوند. اغلب در این واکنش هیدروکربنهای بزرگ به هیدروکربنهای کوچک شکسته میشوند و هیدروکربنهای اشباع با از دست دادن هیدروژن به هیدروکربنهای غیراشباع تبدیل میشوند. محصول این واکنش مخلوطی از انواع هیدروکربنها میباشد (۱). اهمیت اتیلن و پروپیلن از پیوند دوتایی در ساختار مولکولی آنها ناشی میشود، که منجر به واکنشپذیری و تبدیل صنعتی آنها به انواع محصولات میانی و نهایی میشود (۲). این در حالی است که هیدروکربنهای اشباع شده همانند اتان و پروپان واکنش افزایشی نمی دهند؛ بنابراین، برای تولید پلیمرها باید اتیلن و پروپیلن خالص بدست آورد (۳). چاشیرانگیز بودن بداسازی مخلوطهای اتان–اتیلن و پروپان-پروپیلن به علت خواص و ساختار مشابه آنهاست (۴). جداسازی پارافینهای سبک روپان واکنش افزایشی نمی دهند؛ بنابراین، برای تولید پلیمرها باید اتیلن و پروپیلن خالص بدست آورد (۳). چاشیرانگیز بودن از الفین ها غالبا توسط تقطیر برودتی انجام میگیرد (۵). در روش تقطیر برودتی، بدلیل نیاز به فشار بالا و دمای پاین، انرژی فراوانی مصرف میشود (۶). بنابراین تحقیقات به سمت جایگزینی یک سیستم جداسازی ارزان و کوچکتر، که قادر به جداسازی کارآمد الفینها از پارافینهای متناظرشان در دماهای بالاتر باشد، هدایت میشود (۵). در جداسازی با استفاده از جاذبهای میزاخر انرژی کمتری مصرف میشود و برخلاف روش تقطیر برودتی که جداسازی را براساس اختلاف دمای جوش انجام میدهد، جاذبهای متخلخل جداسازی را براساس خواص فیزیکی انجام میدهند (۶).

۲-روش

چارچوبهای فلز-آلی (MOF) میتوانند به عنوان جایگزینی برای روش تقطیر برودتی، در جداسازی مخلوطهای گازی عمل کنند. دلیل این جایگزینی انتخابپذیری و کارآیی بالای MOF ها در جذب مولکولهای گازهاست (۷). برای تعیین بهترین چارچوب برای یک فرایند جداسازی، عواملی مثل؛ هزینه، پایداری، قابلیت پردازش و تاثیر محیط زیست باید مدنظر قرار گیرد (۶). اکنون ظرفیت جذب و جداسازی انتخابی، در چارچوبهای فلز-آلی سری همخانواده ZUL که دارای اندازه منافذ مناسب برای مولکولهای اتان و پروپان هستند؛ به عنوان جاذبهای کارآمد، مورد بررسی قرار می گیرد. در این تحقیق جذب و جداسازی مخلوط های گازی اتان-اتیلن و پروپان-پروپیلن با استفاده از روش جذب انتخابی بر روی چارچوب های فلز-آلی همساختار 200 - 200 - 200 - 200 - 200 - 200 - 200 - 200 - 200 - 200 با استفاده از محاسبات شبیه سازی مولکولی مونت کارلو در مجموعه بندادی بزرگ (GCMC) مورد ارزیابی قرار می گیرد. ویژگیهای ساختاری و شیمیایی موثر چارچوبها و تفاوت آنها مرجومهای بندادی بزرگ (GCMC) مورد ارزیابی قرار می گیرد. ویژگیهای ساختاری و شیمیایی موثر چارچوبها و تفاوت آنها در جذب و جداسازی گازها و مخلوطهای آنها نیز مورد بررسی قرار می گیرد. 200 های مختلف MOF های مختلف که با گروههای راس مختلف در یک چارچوب موج شکل ایجاد می شوند. آنها تفاوت کمی در پایداری حرارتی، در دماهای بالا با یکدیگر دارند(۷). انتخاب بین آنها، برای کاربردهای خاص تحت تاثیر عواملی مانند، محدوده دمای عملیاتی مورد نیاز، است. هزینه استفاده از یک-MOF در برنامه های کاربردی بستگی به نیازها و مزایای خاص ارائه شده توسط هر MOF، دارد که استفاده از دارند(۷). انتخاب مین آنها، برای کاربرده بستگی به نیازها و مزایای خاص ارائه شده توسط هر مرد.

۳-نتیجه گیری

MOF های فرامیکرومتخلخل دوبعدی فلوردار لایهای مانند مواد ZUL بدلیل اندازه منافذ قابل تنظیم و انعطاف پذیری ساختاری ، عملکرد امیدوار کنندهای در جداسازی اتان-اتیلن (C₂H₆/C₂H4) و پروپان-پروپیلن (C₃H₈/C₃H6) نشان میدهند. آنها بالاترین درجه بهرهوری از درجه پلیمر اتیلن و پروپیلن را دارند و میتوانند اتان و پروپان با خلوص بالا بدست آورند.

٤ - مراجع

- 1. Herm, Z. R., Bloch, E. D., & Long, J. R. (2014). Hydrocarbon separations in metal–organic frameworks. Chemistry of Materials, 26(1), 323-338. DOI: 10.1021/cm402897c
- Benali, M., & Aydin, B. (2010). Ethane/ethylene and propane/propylene separation in hybrid membrane distillation systems: Optimization and economic analysis. Separation and purification Technology, 73(3), 377-390. DOI: 10.1016/j.seppur.2010.04.027
- Yang, L., Zhou, W., Li, H., Alsalme, A., Jia, L., Yang, J., ... & Chen, B. (2020). Reversed ethane/ethylene adsorption in a metal-organic framework via introduction of oxygen. Chinese Journal of Chemical Engineering, 28(2), 593-597. DOI: 10.1016/j.cjche.2019.09.005
- Corma, A., Melo, F. V., Sauvanaud, L., & Ortega, F. (2005). Light cracked naphtha processing: Controlling chemistry for maximum propylene production. Catalysis Today, 107, 699-706. DOI: 10.1016/j.cattod.2005.07.109
- Banerjee, D., Liu, J., & Thallapally, P. K. (2015). Separation of C2 hydrocarbons by porous materials: metal organic frameworks as platform. Comments on Inorganic Chemistry, 35(1), 18-38. DOI: 10.1080/02603594.2014.976704.
- Geier, S. J., Mason, J. A., Bloch, E. D., Queen, W. L., Hudson, M. R., Brown, C. M., & Long, J. R. (2013). Selective adsorption of ethylene over ethane and propylene over propane in the metal–organic frameworks M 2 (dobdc)(M= Mg, Mn, Fe, Co, Ni, Zn). *Chemical Science*, 4(5), 2054-2061. DOI: 10.1039/c3sc00032j
- Gholami, M., & Yeganegi, S. (2018). Molecular simulations of adsorption and separation of ethylene/ethane and propylene/propane mixtures on Ni2 (dobdc) and Ni2 (m-dobdc) metal-organic frameworks. Molecular Simulation, 44(5), 389-39. DOI:10.1080/08927022.2017.1387916



مطالعهی توانایی میدانهای نیروی مبتنی بر OPLS در محاسبهی خواص ساختاری مایعاتیونی دوکاتیونی

زهرا استادشریف معمار^{او»}، مجید موسوی^۲ ۱ و*- محقق پسادکتری شیمیفیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، zahra.ostadsharif@sci.ui.ac.ir m.mousavi@sci.ui.ac.ir - استاد گروه شیمیفیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، m.mousavi

واژگان کلیدی: میدان نیرو، مایعیونی دوکاتیونی، شبیهسازی دینامیک مولکولی از اساس

۱– مقدمه

درک درست خواص فیزیکی و شیمیایی مایعاتیونی، به توصیف دقیق برهم کنشهای مختلف کاتیون-آنیون وابسته است. بنابراین، مطالعات محاسباتی مختلفی از جمله مکانیک کوانتومی، شبیهسازی دینامیک مولکولی از اساس (AIMD) و شبیهسازی دینامیک مولکولی مبتنی بر میدانهای نیرو (FFMD) برای محاسبه خواص میکروسکوپی و ماکروسکوپی مایعاتیونی دوکاتیونی انجام شدهاست. شبیهسازی AIMD روشی بسیار دقیق برای توصیف ساختار میکروسکوپی و برهم کنشهای بین مولکولی مایعاتیونی است که در آن ساختار الکترونی در هر مرحلهی زمانی از شبیهسازی محاسبه میشود. اما این روش هزینهی محاسباتی زیادی دارد و به شبیهسازی سیستمهای کوچک در مقیاس زمانی چندپیکوثانیه محدود میشود (روس، ۲۰۲۱). بنابراین، برای شبیهسازی سیستمهای بزرگتر با زمانهای شبیهسازی طولانی، استفاده از شبیهسازی FFMD که به منابع محاسباتی کمتری نیاز دارد، سودمند است (کمپتر، ۲۰۱۰). در پژوهش حاضر، به این سوال پاسخ داده خواهد شد: آیا پارامترهای محاسباتی کمتری نیاز دارد، سودمند است (کمپتر، ۲۰۱۰). در پژوهش حاضر، به این سوال پاسخ داده خواهد شد: آیا پارامترهای میدانهای نیروی مبتنی بر CPLS توانایی خوبی برای بازتولید برهم کنشهای کاتیون مشابه با نتایج شبیهسازی AIMD

۲- روشهای محاسباتی

۳- نتایج و بحث

توابع توزیع شعاعی بین هیدروژنهای مختلف کاتیون و اتمهای اکسیژن آنیون در شکل ۱ نشان دادهشده است. توابع توزیع شعاعی شبیه سازی AIMD نشان می دهد که احتمال برهم کنش بین اتم O آنیون با هیدروژنهای حلقهی ایمیدازولیوم بیشتر از برهم کنش آن با هیدروژنهای زنجیره است. زیرا در مقایسه با اتمهای هیدروژن آلیفاتیک، اولین پیک آنها تیزتر است و در فواصل کوتاه تری رخ می دهد. علاوه براین، می توان مشاهده کرد که شدت برهم کنش اتمهای اکسیژن آنیون با اتم H_R کاتیون بیشتر از برهم کنش آن با اتمهای دیH_{W1},H_{w2} می می شد و قوی ترین پیوند هیدروژنی را تشکیل می دهد. این مشاهدات را می توان به بار جزئی بیشتر اتم H_H ناشی از مجاورت آن به هر دو اتم نیتروژن نسبت داد. همانطور که در این شکل نشان داده شده است، میدان نیروی AIMD - با بار کل P ۲۰/± و میدان نیروی OPLS-VSI با بار کل P ۶/۱± در مقایسه با میدان نیروی AIMD - میدان نیروی AIMD - با بار کل P ۲۰/± از نظر موقعیت و مخصوصا شدت پیکها تطابق خوبی با نتایج شبیه سازی OPLS-2009 دارند. به عبارت دیگر، شدت برهم کنش بین اتمهای اکسیژن آنیون با هیدروژنهای مختلف کاتیون در میدان نیروی -2003 2003 - 2014 می با بار کل P ۲۰/± از نظر موقعیت و مخصوصا شدت پیکها تطابق خوبی با نتایج شبیه سازی OPLS-2009 میدان نیروی 2004 - 2013 با بار کل P ۲۰/± و نظر موقعیت و مخصوصا شدت پیکها تطابق خوبی با نتایج شبیه میدون در که دارند. به عبارت دیگر، شدت برهم کنش بین اتمهای اکسیژن آنیون با هیدروژنهای مختلف کاتیون در میدان نیروی -2005 2005 - 2009 می میدور و موقعیت پیکهای ایز با پیکهای اکسیژن آنیون با میدروژنهای مختلف کاتیون در میدان نیروی -2005 مشابه هستند و نزدیک به شدت برهم کنش ها در شبیه سازی می ایم می توان نتیجه گرفت که بار کل مایعیونی دوکاتیونی می میدوان مشاهده کرد که در شبیه سازی می می میدون نیروی میتوان نتیجه گرفت که بار کل مایعیونی دوکاتیونی موردمطالعه و نحوهی توزیع میدان نیروی OPLS-2009 در مقاس با میدان نیروی AIMD در شایع مختلف بی می توان نیروی AIMS می میدان نیروی AIMS می می میدان نیروی AIMS می می توان نیروی AIMS می می این نیروی AIMS می ای زیخ می می ایت در واقع، دو میدان نیروی AIMS در شیم می می می می ای شریم می می ای می می می می می می می می ای زیخ می می می می نیزیخ می می می ای نیروی AIMS می می می می ای نیروی AIMS می می می ای نیروی A



شکل ۱: مقایسهی توابع توزیع شعاعی حاصل از شبیهسازی AIMD و میدانهای نیروی مختلف مبتنی بر OPLS برای برهم-کنش بین هیدروژنهای مختلف کاتیون با اتم اکسیژن آنیون در ۳۳۳/۱۵ و atm ۱.


۴- نتیجهگیری

در این پژوهش، توانایی میدانهای نیروی OPLS-2009IL، OPLS-2009IL و OPLS-VSIL و OPLS-VSIL برای بازتولید برهم کنشهای مختلف در مایعاتیونی دوکاتیونی 2[NTF2][NTF2] با مقایسهی نتایج آنها با نتایج شبیهسازی AIMD مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان داد بر خلاف میدان نیروی 0.8*OPLS-2009IL، توابع توزیع شعاعی حاصل از هر دو میدان نیروی OPLS-2009IL با بار کل e ۲/۰ و OPLS-2009IL بار کل e ۱/۶ و دارای یک سایت مجازی در داخل حلقهی ایمیدازولیوم، از نظر موقعیت و شدت پیکها تطابق خوبی با نتایج شبیهسازی AIMD دارند.

منابع و مراجع

Roos, E., & Brehm, M. (2021). A force field for bio-polymers in ionic liquids (BILFF)-part 1:[EMIm][OAc]/water mixtures. Physical Chemistry Chemical Physics, 23(2), 1242-1253.
 Kempter, V., & Kirchner, B. (2010). The role of hydrogen atoms in interactions involving imidazolium-based ionic liquids. Journal of Molecular Structure, 972(1-3), 22-34.

بررسی تاثیر کمپلکس شدن با یونهای فلزی بر اسیدیته پیرولوکینولین کینون

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

بهنوش اسلام پناه '، على ابراهيمي '، نجمه مصطفوي "

۱- دانشجو، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، behnoush.ep2022@gmail.com
 ۲- استاد، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، najmehmostafa@pgs.usb.ac.ir

واژگان كليدى: پيرولوكينولين كينون، تشكيل كمپلكس، اسيديته

۱– مقدمه

پیرولوکینولین کینون (PQQ)، یک هتروسیکل سه حلقهای آروماتیک اورتوکینون با دو گروه کتونی و سه گروه کربوکسیلیک اسید است [۱]. این ترکیب از طریق مکانیسمهای مختلف از جمله فعالیتهای اکسایش/کاهش، مهار رادیکال و اصلاح مسیرهای سیگنالی یاخته، برای سلامتی انسان مفید است [۲]. نمک دی سدیم آن نیز دارای فعالیت بیشتری است [۳]. PQQ از جهت اتصال به یونهای فلزی در موقعیت دو اکسیژن کینونی دارای اهمیت زیادی است [۴]. در این پژوهش، پایداری کمپلکسهای آن با یونهای فلزی دو ظرفیتی ^{+B}B²، ^{+B2}، ^{Ca²⁺} و تاثیر آن بر اسیدیتهی سه گروه عاملی PQQ بررسی شده است.

۲- روش

محاسبات مکانیک کوانتومی روی PQQ، شکلهای دپروتونه آن و کمپلکسهای آن با یونهای فلزی (شکل۱)، در سطح نظری M06-2X/6-311++G(d,p) (برای یون فلزی +Sr²، از مجموعه پایه LANL2DZ استفاده شده است) با استفاده از نرم افزار Gaussian 09 در فاز گازی و محلول انجام شده است. محاسبات SCRF توسط مدل SMD در حلال آب و DMSO انجام شده است. به منظور تخمین اسیدیته، مقادیر pKa گروههای عاملی در PQQ و کمپلکسهای آن در حلال به کمک نتایج حاصل از مدل SMD محاسبه شده است (جدول۱). برای بررسی ارتباط بین اسیدیته گروههای عاملی و توزیع چگالی بار الکترونی، آنالیز مکان شناختی چگالی الکترونی با روش AIM توسط نرم افزار AIMALL انجام شده است.

۳- بحث

 نشان میدهد که در پایداری آنها نقش دارند. بررسی پیوندهای هیدروژنی درون مولکولی نشان میدهد که قوی ترین آنها مربوط به آن است. قوی ترین پیوندهای هیدروژنی درون مولکولی در کمپلکس ⁺²PQQ⁻² و PQQ⁻² و کمپلکس افزایش می یابد. این مقادیر برای ضعیف ترین آنها در کمپلکس ⁺²PQQ⁻² مشاهده میشود. مقادیر _a pK_a با تشکیل کمپلکس افزایش می یابد. این مقادیر برای PQQ و کمپلکسهای آن، برای گروه عاملی اسیدی در موقعیت ۲ بزرگ تر از دو موقعیت دیگر است. در حذف پروتون از گروه عاملی در موقعیت ۲ (جداشدن Hb اسیدی)، در ساختار اصلی و کمپلکس آن، Hb حلقهی پیرول به اتم dO گروه کربوکسیلیک اسید منتقل میشود. همچنین اسیدیته گروه عاملی ۲ در کمپلکس، بزرگ تر از اسیدیتهی سایر گروههای عاملی در آن کمپلکس است. بزرگ ترین اسیدیته گروه عاملی ۲ مربوط به کمپلکس تشکیل شده با Be و کوچک ترین آن مربوط به کمپلکس تشکیل شده با Sr است. مقادیر چگالی الکترونی در نقاط بحرانی پیوندهای ها Ga-H_b، Ga-H_b و کوچک ترین آن مربوط به کمپلکس تشکیل شده با SP است. مقادیر چگالی الکترونی در نقاط بحرانی پیوندهای هیده با Be و کوچک ترین آن مربوط به کمپلکس تشکیل شده با SP است. مقادیر چگالی الکترونی در نقاط بحرانی پیوندهای ها Ga-H_b، Ga-H_b و Ga-H_b، حاصل از آنالیز MIN و مقادیر طول پیوندهای ذکر شده نشان میده در مال از سه H_b و Ga-H_b مر_b-H_b و Ga-H_b مروری که در دیروتونه کردن گروه مقادیر میشود. لذا اسیدیته گروه عاملی H⁻ از سه گروه اسیدی OOOP بیشتر است به ط.وری که در دیروتونه کردن گروه

جدول ۱: مقادیر pK _a محاسبه شده برای گروههای عاملی ۱ تا ۳									
SMD	در PQQ و کمپلکسهای فلزی در حلال آب با مدل SMD								
Name	рK _a	Name	рK _а	Name	рK _а				
1	۰.۹۴	2	-۲.۴۵	3	•.97				
Beı	-1.08	Be₂	-9.79	Be₃	-1.79				
Mg1	۳۸. ۰ –	Mg ₂	-0.48	Mg₃	-•.94				
Caı	۰.۱۳	Ca ₂	-٣.٣٠	Ca₃	۵۶.۰-				
Sr1	۰.۵۶	Sr ₂	-۳.۲۰	Sr₃	٠.٠٩				



شکل ۱: ساختار PQQ

۴–نتیجه گیری

اسیدیته گروه عاملی در موقعیت ۲ در PQQ و کمپلکسهای فلزی ^{+P}QQ⁻⁺M2 بیشتر از سایر موقعیتهاست. تشکیل کمپلکس فلزی باعث افزایش پایداری کاتیون و بنابراین افزایش اسیدیته گروه عاملی میشود. گروه عاملی NH، واقع در حلقه پنج تایی راحت ر از گروههای اسیدی COOH پروتون از دست میدهد؛ بنابراین پتانسیل حذف پروتون اسیدی از گروه عاملی اسیدی واقع در موقعیت ۲ بطور ظاهری افزایش مییابد. تشکیل کمپلکس فلزی چگالی بار مثبت روی گروه عاملی، بخصوص گروه عاملی NH را افزایش داده، حذف پروتون از گروههای عاملی را آسان تر میکند و pK را افزایش میدد. لذا نتایج محاسبات من وجهار مین کنفران شیمی فنریک ایران معقول کی با بران دانتگاه اصفهان ۲۹و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

۵-منابع و مراجع

[1] Toyama, H. (2016). Pyrroloquinoline Quinone (PQQ). Industrial Biotechnology of Vitamins, Biopigments, and Antioxidants, 367-388.

[2] Klinman, J. P., & Bonnot, F. (2014). Intrigues and intricacies of the biosynthetic pathways for the enzymatic quinocofactors: PQQ, TTQ, CTQ, TPQ, and LTQ. *Chemical reviews*, *114*(8), 4343-4365.

[3] Ming, D., Huang, C., Wang, W., Wang, Z., Shi, C., Yin, X., ... & Wang, F. (2021). Effects of diet supplemented with excess pyrroloquinoline quinone disodium on growth performance, blood parameters and redox status in weaned pigs. *Animals*, 11(2), 359.

[4] Wanner, M., Sixt, T., Klinkhammer, K. W., & Kaim, W. (1999). First experimental structure of a 1: 1 metal complex with a PQQ cofactor derivative outside dehydrogenase enzymes. *Inorganic Chemistry*, 38(11), 2753-2755.



بررسی اثرات یان –تلر در انحراف سیستم های مولکولی (SeX2(X=F,Cl,Br,I

على اسماعيلى

گروه شیمی،وزارت آموزش و پرورش،استان مرکزی،محلات Email:esmaeili.ali42031@gmail.com

واژگان کلیدی: اثر یان --تلر، ثابت جفت شدن، اوربیتال پیوندی طبیعی،انرژی پایداری

۱– مقدمه

این تحقیقات نشان می دهد که دلیل انحراف از ساختار خطی در این ترکیبات اثر شبه یان –تلراست. این اثر ساختار هندسی با تقارن بالا را به تقارن پایین تبدیل می کند .در چنین سیستم هایی،بر اثر انتقال الکترون از بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده به پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده ساختار الکترونی کل تغییر می کند.اثر شبه یان -تلر یک اثر ارتعاشی هست که در آن انتقالات الکترونی به وسیله حضور توابع ارتعاشی در گشتاور جهش مرتبط به انتقال الکترون مجاز خواهد بود[۱-۴].در سال ۲۰۱۸ نیلچی و غیاثی به بررسی اثر شیه یان-تلر در مولکول های X=F,Cl,Br,I) Si4X4) با سطح تئوری -B3LYP/Def2) با پداخته اند.در اینجا مولکول ها با کاهش تقارن از فرم مسطح (D_4) به فرم غیر مسطح (C_2)) به پایداری می TZVPP رسند[۵].طالع و فضائلی در سال ۲۰۱۹ با سطوح محاسباتی -B3LYP/Def2-TZVPP,MP2/Def2 TZVPP,M062X/Def2-TZVPP نشان دادند که مولکول بنزن دارای ساختار مسطح (D_{6h}) می باشد در حالی که به موجب جفت شدن ارتعاشي بين حالت هاي [HOMO(E1g)→LUMO(E2g] در Sn₆H₆,Ge₆H₆,Si₆H₆,Si₆H₆,Ti حالت يايدار ساختار ترانس خمیده با تقارن (D_{3d}) می باشد.انحراف از پیکربندی های تقارن بالا در این ترکیبات به دلیل وجود اثر شبه یان-تلر می باشد[۶].همچنین در سال ۲۰۱۹ محمودی زاده و غیاثی به بررسی پایداری مولکول های ⁻X=H,F,Cl,Br) C₂X4 (۸) با سطح تئوری HF/Def2-TZVPP پرداختند .در این مطالعه بر اثر کاهش تقارن ($D_{2h}
ightarrow C_{2h}$) بر طبق اثر شبه یان-تلر پایداری مولکول ها افزایش می یابد.این اثر مربوط به جفت شدن ارتعاشی بین حالت پایه B_{2g} و حالت برانگیخته A_g با مسئله دو ترازی PJT(²B_{2g} +²A_g)×b_{2g} است که دلیل آن پدیده شکستن تقارن و غیر همسطح شدن حلقه چهار عضوی است[۷]. برای ترکیبات این مقاله توزیع الکترون به وسیله روش جالب TD-DFT بررسی می شود .روش TD-DFT در مطالعه حالت های برانگیخته و پایه ساختار های الکترونی از ساختار های خطی و خمیده استفاده می شود.[۵-۱۰]

۲-روش های محاسبات

همه محاسبات با مجموعه برنامه گوسین 09 انجام شده است[۱۱].مجموعه پایه استاندارد Def2-TZVPP در محاسبات استفاده شده است[۱۲].خصوصیات پیکربندی و ساختار ،سختی کل ، الکترونگاتیوی کل از ترکیبات X=F,Cl,Br,I)SeX2) با

استفاده از سطح تئوریB3LYP/Def2-TZVPP انجام شد .آنالیز جمعیت به وسیله روش اوربیتال پیوندی طبیعی [۱۳] با سطح تئوری گفته شده و با استفاده از برنامه NB0.6 [۱۴]از مجموعه برنامه گوسین 09 انجام شده است.

دانسكاه اصفهان ٢٩ و ٣٠ بان ١٤٠٣

۳- نتايج و بحث

۳-۱-جنبه های انرژی

برای هر سیستم چند اتمی دارای ساختار هندسی با بالاترین تقارن ، دو یا چند حالت الکترونی وجود دارد که با جابجایی هسته ای در تاثیر متقابل بوده و این تاثیر متقابل منجر به ناپایداری می گردد.در مورد مولکول های مورد مطالعه به دلیل وجود گره شعاعی جابجایی نامناسبی از اوربیتال های دهنده به گیرنده در ساختار خطی وجود دارد بنابراین توزیع الکترونی غیر مجاز خواهد بود.در نتیجه سیستم انحراف پیدا می کند و گره شعاعی برداشته می شود و توزیع الکترونی مجاز می گردد شکل (۱).در ساختار خطی 0.0=Q تحت جابجایی هسته ای انحراف نمی تواند اتفاق افتد .در طول خمیدگی به وسیله تغییر در طول پیوند، زاویه پیوندو انرژی پیوند دستخوش تغییر می شود.

مولکول های سلنیوم دی فلوئورید(۱)، سلنیوم دی کلرید(۲)، سلنیوم دی برمید(۳)و سلنیوم دی یدید(۴) با سطح تئوری مولکول ها در B3LYP/Def2-TZVPP در ساختار هندسی خطی(d_{2}) و خمیده (C_{2v}) بهینه شده است.انرژی مطلق این مولکول ها در جدول(۱) لیست شده است.آنالیز ارتعاشی در تقارن(d_{2}) ۹ فرکانس منفی را نشان می دهد .مقادیر این فرکانس ها به همراه ثابت نیرو در جدول(۲) جمع شده است.تقارن مد های ارتعاشی از فرکانس منفی را نشان می دهد .مقادیر این فرکانس ها به همراه شدا ایست. شده است.انرژی مطلق این مولکول ها در مالت اییست شده است.آنالیز ارتعاشی در تقارن(d_{2x}) ۶ فرکانس منفی را نشان می دهد .مقادیر این فرکانس ها به همراه ثابت نیرو در جدول(۲) جمع شده است.تقارن مد های ارتعاشی از فرکانس های منفی(Π_u) است.شکل(۲) مد های ارتعاشی را نشان می دهد.مشاهده می شود که مد های ارتعاشی تقارن مولکول را از خطی(d_{2x}) به خمیده(C_{2y}) تغییر می دهد.انحراف نشان می دهد.مشاهده می شود که مد های ارتعاشی تقارن مولکول را از خطی(d_{2x}) به خمیده(C_{2y}) تغییر می دهد.انحراف ساختار هندسی با تقارن بالا (d_{2x}) به موجب اثر شبه یان –تلر است.

جدول ۱: انرژی الکترونی تصحیح شده (بر حسب ΔE، (Hartree) ،ΔE/ برحسب¹ kcal mol) وپارامتر های ساختاری محاسبه شده از ساختار های خطی (D∞h) و خمیده (C₂v) برای ساختار های خطی و خمیده ترکیبات ۱ تا ۴ با استفاده از روش B3LYP/Def2-TZVPP

Compound	E ₀	ΔE	r _{Se -X}	$\Delta[r_{Se-X}(D_{\infty h})\text{-}r_{Se-}$	$\theta_{Se-X-Se}$	$\Delta [\theta_{X-Se-X} (D_{\infty h})-\theta_{X-}]$				
				$X(C_{2v})$		$Se-X(C_{2v})$				
	SeF ₂									
C _{2v}	7801.872018-	0.0	1.74716	0.08	97.153	82.85				
$D_{\infty h}$	78.1.701088-	46.43	1.83212	-	180.0					
	·		•	SeCl ₂						
C _{2v}	8877.089808-	0.0	2.17743	0.118	102.119	77.88				
$D_{\infty h}$	۳۳۲۱.۹۸۰۷۵۲-	43.29	2.29540		180.0					
	·		•	SeBr ₂						
C _{2v}	V&F9.9V&+8F-	0.0	2.33902	0.118	103.478	76.52				
$D_{\infty h}$	4249.911147-	40.16	2.45690		180.0					
SeI ₂										
C _{2v}	7997.77777-	0.0	2.54133	0.12	105.077	74.92				
$D_{\infty h}$	2997.187948-	37.65	2.66259		180.0					

جدول ۲: شکاف انرژی(Δ,ev)،فرکانس ارتعاشی و ثابت نیروی اولیه بین حالت پایه و حالت برانگیخته (Π_u) محاسبه شده از ترکیبات ۱ تا ۴

Compound	SeF ₂	SeCl ₂	SeBr ₂	SeI ₂
ν ₁	-265.9235	-200.8733	-162.2916	-153.8530
Force constant	1.0493	1.1272	1.2349	1.3230
Δ	2.58	1.13	0.79	0.40

نماد ترم حالت پایه در تقارن ($D_{\infty h}$) برای مولکول های مطالعه شده (Σ_g) است .تاثیرات اصلی این انحراف ها از ساختار خطی با تقارن بالا ($D_{\infty h}$) به فرم خمیده ($D_{\infty h}$) از ترکیبات به طور عمده به موجب اثر شبه یان-تلر است که با مخلوط شدن حالت پایه (Σ_g) و برانگیخته ($D_{\infty h}$) مر تبط است.با مخلوط شدن اوربیتال های (Σ_g) $\Psi_{HOMO}(\Sigma_g)$ و برانگیخته (Π) مرتبط است.با مخلوط شدن اوربیتال های (Σ_g) $\Psi_{HOMO}(\Gamma_u)$ در این ترکیبات در نتیجه پایه (Σ_g) و برانگیخته (Π) مرتبط است.با مخلوط شدن اوربیتال های (Σ_g) و برانگیخته (Π_u) مرتبط است.با مخلوط شدن اوربیتال های (Σ_g) $\Psi_{HOMO}(\Gamma_u)$ در این ترکیبات در نتیجه ایک (Π_u) مرتبط است.با مخلوط شدن اوربیتال های (Σ_g) و برانگیخته است. $\Psi_{LUMO}(\Pi_u)$ مسئله دو ترازی Π_u (Π_u) مرتبط است. اندرژی حالت های پایه و برانگیخته و تغییرات آنها با توجه به جابجایی (Π_u) (Π_u) در شکل (7) نشان داده شده است. بر طبق شکل (۲) ، انحنای منحنی پایین (مرتبط با حالت پایه ساختار الکترونی) از سطح در شکل (7) نشان داده شده است. بر طبق شکل (۲) ، انحنای منحنی پایین (مرتبط با حالت پایه ساختار الکترونی) از سطح ترژی پتانسیل آدیاباتیک منفی است. اما در منحنی های بالا (متناظر با ساختاری هندسی برانگیخته که با منحنی پایین با نرژی پتانسیل آدیاباتیک منفی است. اما در منحنی های بالا (متناظر با ساختاری هندسی برانگیخته که با منحنی پایین با توجه به جابجایی (Ω_{III}) تاثیر متقابل دارند) انحنا مثبت است.بر طبق محاسبات مقادیر انرژی مینیم در امتداد انحراف نرمال کوئوردینه (Ω_{III}) انرژی اثر یان – آلا می باشد(Π_{III}). مقادیر این این (Ω_{III}) ایرژی مینیم در امتداد انحراف نرمال کوئوردینه (Ω_{III}) انرژی اثر یان – آلامی در این (Ω_{III}) میادند (Ω_{III}) میادند (Ω_{III}) مینده می شود.تفاوت در مقادیر انرژی مینیم و مقادیر انرژی کران (Ω_{III}) انرژی اثر یان – آلامی در این (Ω_{III}) میاد (Ω_{III}) میاد (Ω_{III}) مینده می میاد (رای (Ω_{III})) انرژی ایز (Ω_{III}) میاد (Ω_{III}) مینده (Ω_{III}) م

:F=3.98 Cl=3.16, Br=2.96, I= 2.66_{p} (x) E_{JT}= $6.1071\chi_{p} + 22.561$: R² = 0.9281

از این رو یک اثر یان-تلر قوی در هالوژن ها با الکترونگاتیوی بیشتر وجود دارد و SeF2 به موجب اثر یان-تلر پایدارتر است.



شکل ۲: نمودارهای انرژی حالت پایه و حالت های برانگیخته بر حسب v، در راستای شیوه ارتعاشی (IIu) برای مولکول های (SeX2(X=F,Cl,Br,I) برای مولکول های

جدول ۳: مقادیر انرژی مطلق (.a.u) ساختار های h∞h و مقادیر انرژی مطلق مینیمم در راستای شیوه ارتعاشی (Q(пu) مدول ۳ ،نقاط انرژی مینیمم (Å) و انرژی پایداری یان −تلر (EJT,kcal/mol) از مولکول های (SeX2(X=F,Cl,Br,I) با سطح

Compound	r _{min}	E(min)	EJT
SeF ₂	0.7	-2601.3286661	46.43
SeCl ₂	0.6	-3322.051781	43.30
SeBr ₂	0.6	-7549.9766056	40.16
SeI ₂	0.6	-2997.2294786	38.28

۲-۲-پارامتر های ساختاری

 $\Delta[\theta_{X-Se-X} (D_{\infty h})-\theta_{X-Se-X} (C_{2v})] = 0.9214E_{JT} + 39.305; R^2 = 0.9292$

۳–۳–پارامتر های ساختاری

 $\Delta[\theta_{X-Se-X} (D_{\infty h})-\theta_{X-Se-X} (C_{2v})] = 0.9214E_J + 39.305; R^2 = 0.9292$

جدول ۴: انرژی های محاسبه شده (بر حسب a.u.) از HOMO (ε Lumo)، HOMO (ε Lumo)، ε Lumo-ε Homo، LUMO (ε Lumo)، (γ) و و پارامتر های سختی کل (γ بر حسب ev) ، الکترونگاتیوی کل (γ) . Δη، (γ (بر حسب kcal/mol) برای ساختار های خطی (D∞h) و خمیده (C2v) از ترکیبات ۱ تا ۴ با سطح تئوری B3LYP/Def2-TZVPP

	\mathcal{E}_{HOMO}	${\cal E}$ LUMO	\mathcal{E} LUMO- \mathcal{E} HOMO	η	x	Δη	$\Delta \chi$
Geometry							
SeF ₂ , C _{2v}	-0.25703	-0.09934	4.29	2.14	0.17818	1.68(37.74)ª	-0.07803(-48.96)ª
SeF ₂ , D _{∞h}	-0.27335	-0.23908	0.933	0.46	0.25621	0.00000	0.00000
SeCl ₂ , C _{2v}	-0.25073	-0.11200	3.77	1.88	0.18136	1.46(33.67)ª	-0.06846(-42.95)ª
SeCl ₂ , D _{∞h}	-0.26536	-0.23428	0.84	0.42	0.24982	0.00000	0.00000
SeBr ₂ , C _{2v}	-0.24664	-0.12647	3.27	1.63	0.18655	1.24(28.59)ª	-0.05674(-35.60)ª
SeBr₂, D∞h	-0.25790	-0.22869	0.79	0.39	0.24329	0.00000	0.00000
Sel ₂ , C _{2v}	-0.23648	-0.13431	2.78	1.39	0.18539	1.03(23.75) ^a	-0.04492(-28.18)ª
Sel ₂ , D _{∞h}	-0.24376	-0.21687	0.73	0.36	0.23031	0.0000	0.00000

همچنین شکاف HOMO – LUMO و سختی کل از تقارن (م∞)به تقارن (C_{2v}) افزایش می یابد.همانطور که از اصل مینیمم انرژی (MEP) و اصل ماکزیمم سختی (MHP) انتظار می رود ، در حالی که یک ساختار از پایدارترین حالت به حالتی با پایداری کمتر تغییر می کند در بیشتر موارد انرژی افزایش می یابد و سختی کاهش می یابد[۱۵–۱۹].همچنین مقادیر شکاف HOMO می استخلاف ها وابسته است به طوری که با کاهش الکترونگاتیوی هالوژن این مقادیر کاهش می یابد.بین شکاف HOMO– به ویژگی استخلاف ها وابسته است به طوری که با کاهش الکترونگاتیوی هالوژن این مقادیر کاهش می یابد.بین شکاف HOMO–LUMO و الکترونگاتیوی پائولینگ (xp) از هالوژن ها رابطه خطی می توان نشان داد.

Gap=1.6798 χ_p -4.1336; R² = 0.9965

علاوه براین تغییرات بر اثر کاهش تقارن سختی رابطه خوبی با E_{JT} نشان می دهد.

 $[\eta(C_{2V})-\eta(D_{\infty h})] = 1.6803E_{JT} - 39.706; R^2 = 0.9809$ ویژگی اسید لوویس و باز لوویس را الکترونگاتیوی کل تعیین می کند .مولکول با χ بزرگتر به عنوان اسید لوویس قوی و مولکول با χ کوچکتر به عنوان باز لوویس قوی شناخته می شوند بر این اساس بر طبق جدول(۴) ترکیب SeF2به عنوان اسید لوویس قوی و ترکیب SeI2 به عنوان باز لوویس قوی بین ترکیبات ۱ تا 4می باشد .با محاسبه پارامتر $[(\Lambda(C_{2V}), \gamma(C_{2V}), \Delta(D_{\infty h})]$ مشاهده می شود که این پارامتر از ترکیب ۱ تا ترکیب 4 افزایش می یابد و این روند با کاهش ErT در فرایند تبدیل کو کره منطبق است و یک رابطه خطی خوب وجود دارد.

 $\Delta[\chi(C_{2V})-\chi(D_{\infty h})] = -2.4857 E_{JT}+65.582; R^2=0.9781$

مراجع

- [1]Bersuker,I,B., Modern aspects of the Jahn– Teller effect theory and applications to molecular problems, Chem.Rev.101(2001)1067.
- [2]Bersuker, I.B., The Jahn-Teller Effect, Cambridge University Press, (2006).

[3]Bersuker,I.B., Pseudo-Jahn–Teller effect A two-state paradigm in formation, deformation, and transformation of molecular systems and solids, Chem. Rev, 113(2013)1351.

[4]Bersuker,I.B., Pseudo Jahn-Teller Origin of Perovskite Multiferroics, Magnetic-Ferroelectric Crossover, and Magnetoelectric Effects: The d 0- d 10 Problem, Phys. Rev. lett,108(2012)137202(1)-137202(2). [5]Burke,K.,Werschnik,J.,Gross,E.U., Time-dependent density functional theory: Past, present, and future,J.Chem.Phys,123(2005)062206.



[6]Bauernschmitt,R.,Ahlrichs,R., A Complete DFT, TD-DFT and Non-Linear Optical Property Study on 6-Amino-2-Methylpyridine-3-Carbonitrile,Chem.Phys.Lett,256(1996)454.

[7]Casida,M.E.,Jamorski,C.,Casida,K.C.,salahub,D.R., Molecular excitation energies to high-lying bound states from time-dependent density-functional response theory: Characterization and correction of the time-

dependent local density approximation ionization threshold, J. Chem. Phys, 108(1998)4439.

[8]Marques,M.A.L.,Gross,E.K.U., Time-dependent density functional

theory, Ann. Rev. Phys. Chem, 55(2004) 427.

[9]Dufty,J.,Luo,K.,Trickey,S.B., Density response from kinetic theory and time-dependent density-functional theory for matter under extreme conditions,Phys.Rev.E,98(2018)033203.

[10]Ning,Z.,Liang,C.T.,Chang,Y.C., Time-dependent density functional theory calculations for the excitation spectra of III-V ternary alloys,Phys.Rev.B,96(2017)085202.

[11]Frisch,M.J.,Truck,G.W.,Schlegel,H.B.,Scuseria,G.E.,Robb,M.A.,et All, Gaussian 09, Revision A.02; Gaussian, Inc.: Wallingford CT (2009).

[12]Weigend,F.,Ahlrichs,R., Balanced basis sets of split valence, triple zeta valence and quadruple zeta valence quality for H to Rn: Design and assessment of accuracy,Phys.Chem.Chem.Phys,7(2005)3297.

[13]Reed,A.E.,Curtiss,L.A.,Weinhold,F., Intermolecular interactions from a natural bond orbital, donor-acceptor viewpoint,Chem.Rev,88(1988)899.

[14]Glendening,E.D.,Badenhoop,J.K.,Reed,A.E.,Carpenter,J.E.,Bohmann,J.A.,Morales,C.M.,Landis,C.R.,Wein hold,F., NBO 6.0: Natural bond orbital analysis program, Journal of computational chemistry,34(2013) 1429-1437.

[15]Ayers, P.W., Parr, R.G., Variational principles for describing chemical

reactions, J.Am. Chem. Soc, 122(2000)2010.

[16]Parr,R.G.,Chattaraj,P.K.,Principle of maximum hardness,J.Am.Chem.Soc,113(1991)1854.

[17]Pearson, R.G., Recent advances in the concept of hard and soft acids and bases, J.Chem.Educ, 64(1987)561.

[18]Pearson, R.G., The principle of maximum hardness, Acc. Chem. Res, 26(1993) 250.

[19]Perason, R.G., A study of correlation of the order of chemical reactivity of a sequence of binary compounds of nitrogen and oxygen in terms of frontier orbital theory, J.Chem.Educ, 76(1999) 570-573.



کاربرد فتوراکتورهای سلول سوختی در فرآیندهای اکسیداسیون پیشرفته و تولید همزمان الکتریسیته

زکیه اسمعیلی'، مینا صدیقی'، مهرداد فرهادیان"، علیرضا سلیمانی نظر ٔ

۱ پسا دکتری مهندسی شیمی، گروه فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان، ac.im اسفهان، zakie.esmaeily@yahoo.com
 ۲ پسا دکتری مهندسی شیمی، گروه فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان، mina.sedighi1986@eng.ui.ac.ir
 ۳ استاد، گروه فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان، m.farhadian@eng.ui.ac.ir
 ۲ دانشیار، گروه فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان، asolaimany@eng.ui.ac.ir

واژگان کلیدی: فتوراکتور، سلول سوختی، فرآیندهای اکسیداسیون پیشرفته، فتوآند، فتو کاتد.

۱– مقدمه

سلول سوختی یک دستگاه الکتروشیمیایی است که از یک واکنش شیمیایی برای تبدیل انرژی ذخیره شده در سوخت به انرژی الکتریکی استفاده می کند (Sazali et al. 2020). اخیراً سلول های سوختی فتوکاتالیستی (PFC) به دلیل توانایی حذف آلاینده های آلی و تولید همزمان الکتریسیته بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. به طور کلی سیستم PFC از الکترودهای آند و کاتد تشکیل شده است. در سیستم PFC، نیمه هادی هایی از نوع n و نوع p قرار گرفته اند، به طوری که هنگام قرار گرفتن در معرض نور، الکترون های محرک فتوکاتالیستی نوع n و حفره های محرک فتوکاتالیستی نوع p ایجاد می شود. قرار گرفتن فتوكاتاليست در برابر نور يک جفت الكترون-حفره ايجاد مي كند. الكترون توليد شده در فتوأند از باند ظرفيت (VB) به نوار رسانایی (CB) و سپس حرکت الکترون به سمت کاتد از طریق یک مدار خارجی، الکتریسیته تولید می کند. در همین حال، حفره ها و رادیکال های هیدروکسیل تولید شده در فتوآند و رادیکال های سوپر اکسید در فتوکاتد می توانند آلاینده ی آلی را حذف كنند (Lee et al. 2017). شكل (۱) بيانگر طرح واره اي از فرآيند اكسيداسيون پيشرفته مي باشد. عملكرد سيستم PFC به انتخاب فتوآند و فتوكاتد بستگی دارد (He et al. 2022). در حوزهی فتوالكتروشیمی، نیمه هادیهای مختلفی مانند TiO₂، BiVO4 ،ZnO ،WO3 و CdS معمولاً به کار میروند. چارچوب های فلزی-آلی (MOFs)، دسته ای از مواد تشکیل شده از یون های فلزی یا خوشه هایی متصل به لیگاندهای آلی هستند و یک ساختار متخلخل ایجاد می کنند. ترکیب چارچوبهای فلزی-آلی با فتوکاتالیستها میتواند به مواد کامپوزیتی جدید با خواص کاتالیزوری پیشرفته و ویژگیهای سطحی منحصر به فرد منجر شود. انواع مختلفی از چارچوب های فلزی-آلی وجود دارد. برخی از انواع رایج عبارتند از: (MIL-101 (Fe)، ZIF-8 ،101 (Cr) و ZIF-67 و ZIF-67 . مشابه فتواند در سیستم PFC، فتوكاتد نیز می تواند بسیار اثر گذار باشد. به طور مثال پلاتین یکی از فتوکاتدهای تجاری است که در مقیاس بزرگ هزینه ی زیادی دارد و همچنین سمی است. هو و همکاران در سال ۲۰۱۹، اکسید مس را با پلاتین مقایسه کردند و به این نتیجه رسیدند که اکسید مس یک جایگزین مناسب برای پلاتین است (He et al. 2019). پژوهش هایی اخیراً در زمینه ی فتوراکتورهای سلول سوختی انجام گرفته اند. به طور مثال، حاجی علی و همکاران

در سال ۲۰۲۴، از سیستم PFC برای حذف آلاینده ی تتراسایکلین و تولید همزمان الکتریسیته استفاده کرده اند. سیستم به کاررفته، سیستمی پیوسته با فتوآند (ZnO/Bi2MoO6/MIL-101) و فتوکاتد (Cu/CuO/Cu₂O) می باشد. نتایج پژوهش ایشان نشان داد که فتوراکتور به کار رفته در کاربردهای طولانی مدت به صورت پایدار عمل می کند. شرایط بهینه در محیط خنثی، مقدار کاتالیست ۸۸/۰ میلی گرم بر سانتی متر مکعب، غلظت تتراسایکلین ۸۰ پی پی ام با بازده حذف حدود ۸۹ درصد و ماکزیمم توان ۲۸/۰ میلی وات بر سانتی متر مربع گزارش گردید (Hajiali et al. 2024). همچنین اشرفی و همکاران در سال ۲۰۲۴، تخریب تتراسایکلین را در یک فتومیکروراکتور سلول سوختی مورد بررسی قرار دادند. فتوآند به کار رفته در این پژوهش، در ۲۰۲۴، تخریب تتراسایکلین را در یک فتومیکروراکتور سلول سوختی مورد بررسی قرار دادند. فتوآند به کار رفته در این پژوهش، در این پژوهش، غلظت آلاینده ی ۲۰ پی پی ام، محیط خنثی، شدت تابش ۲۰۹ میلی وات بر سانتی متر مربع و نرخ جریان ۱۲۰ میکرولیتر بر دقیقه گزارش گردید (Ashrafi et al. 2024).

دانيكاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳



۲- پارامترهای اثرگذار بر عملکرد فتوراکتورهای سلول سوختی در فرآیندهای فتوکاتالیستی

تعیین فتوکاتد و فتوآند در فتوراکتورهای سلول سوختی بسیار در عملکرد این نوع راکتورها اثر گذار است. انتخاب الکترودها همچنین در صرفه ی اقتصادی فتوراکتور می تواند اثرگذار باشد. نوع و طراحی فتوراکتور سلول سوختی نیز یکی دیگر از پارامترهای مؤثر بر عملکرد آن می باشد.

۳- نتیجه گیری

فتوراکتورهای سلول سوختی یکی از تکنولوژی های اخیر در زمینه ی فرآیندهای فتوکاتالیستی می باشد که توسط پژوهشگران مختلف مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته اند. موضوع مهم در این نوع راکتورها الکترودهای آند و کاتد می باشد که در تولید الکترون-حفره و ایجاد قابلیت فتوکاتالیستی بسیار اثرگذار هستند. فتوآندهای مختلفی از اکسیدهای فلزی مختلف نظیر اکسید روی، اکسید تیتانیوم و اکسید آهن در پژوهش های مختلفی مورد بررسی قرار گرفته اند. همچنین فتوکاتدهایی مثل ترکیبات اکسید مس، پلاتین و فولاد زنگ نزن در عملکرد فتوراکتورها بررسی شده اند که ترکیب انتخابی فتوآند و فتوکاتد در آلاینده نقشی اساسی دارد. از دیگر قابلیت های فتوراکتورهای سلول سوختی توانایی همزمان تولید الکتریسیته با حذف آلاینده می باشد که اخیراً در پژوهش های مختلف بسیار مورد توجه بوده است. مرجع میں خبر کے ایران محکم میں خبر کے ایران دانشگاہ اصفہان ۲۹و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

منابع و مراجع

[1] Sazali, N., Wan Salleh, W. N., Jamaludin, A. S., & Mhd Razali, M. N. (2020). New perspectives on fuel cell technology: A brief review. *Membranes*, 10(5), 99.

[2] Lee, S. L., Ho, L. N., Ong, S. A., Wong, Y. S., Voon, C. H., Khalik, W. F., ... & Nordin, N. (2017). A highly efficient immobilized ZnO/Zn photoanode for degradation of azo dye Reactive Green 19 in a photocatalytic fuel cell. *Chemosphere*, *166*, 118-125.

[3] He, Y., Chen, K., Leung, M. K., Zhang, Y., Li, L., Li, G., ... & Li, J. (2022). Photocatalytic fuel cell-A review. *Chemical Engineering Journal*, 428, 131074.

[4] He, Y., Zhang, C., Hu, J., & Leung, M. K. (2019). NiFe-layered double hydroxide decorated BiVO4 photoanode based bi-functional solar-light driven dual-photoelectrode photocatalytic fuel cell. *Applied Energy*, 255, 113770.

[5] Hajiali, M., & Farhadian, M. (2024). Evaluation of a novel continuous baffled photo-reactor for tetracycline degradation and simultaneous electricity production in aphotocatalytic fuel cell. *Renewable Energy*, 226, 120394.
[6] Ashrafi, M., Farhadian, M., Nazar, A. R. S., Hajiali, M., & Noorbaksh, A. (2024). The tetracycline degradation in a photocatalytic fuel cell microreactor using a ZnO nanorod/Bi2MoO6/ZIF-67 photocatalyst responsive to visible light. *Energy Conversion and Management*, 312, 118565.



(بررسی محاسباتی برهمکنش گاز SO2 با سطح بیس (ایمینوتیولیتو)رودیم)

منصوره اصفهانی'، زهرا توانگر

esfahanimansoureh123@gmail.com ا دانشکده، دانشگاه کاشان، esfahanimansoureh123@gmail.com ۲ – نویسنده مسئول: دانشیار شیمی ، شیمی فیزیک، گروه شیمی ، دانشکده علوم پایه و دانشگاه کاشان، z.tavangar@kashanu.ac.ir

واژگان كليدى: جذب، بيس (ايمينوتيوليتو)روديم، DFT، SO₂

۱– مقدمه

فعالیتهای انسانی، گازهای واکنشی مضری مانند SO₂ تولید می کند که سلامت انسان را به خطر میاندازد. نیاز روزافزون به سنجش مؤثر و حذف گازهای آلاینده از محیط، تحقیقات را به سمت مواد پیشرفته جدید سوق داده است (Zergani, 2022). چارچوب های آلی فلزی به دلیل خواص متمایز در فناوری نانو مورد توجه قرار گرفتهاند و برای کاربردهای مختلفی مانند نانوالکترونیک،کاتالیزگری، ذخیره انرژی و حسـگری گاز مناسب هسـتند (Mortazavi, 2018). در این مطالعه، جذب یک مولکول SO2 بر روی سطح بیس (ایمینوتیولیتو)رودیم (RhIT) مورد بررسی قرار گرفتهاست.

۲- روش

(1)

در این پژوهش، همهی محاسبات با نرم افزار DMol³ و با استفاده از نظریه تابعی چگالی اصلاحشده DFT-D2 انجام شدهاست. همچنین از مجموعه پایه دوگانه قطبشی اضافی (DNP)، تقریب شیب تعمیمیافته GGA با تابعی PBE استفاده شده است (Delley, 1990). مقدار k، ۱×۵×۵ برای بهینهسازی ساختارها و ۱×۱۵×۱۵ برای بررسی خواص الکترونی در نظر گرفته شد. انرژی جذب مولکول SO₂ روی تک لایه RhIT با استفاده از رابطهی زیر بدست آمد:

 $E_{ads} = E_{Molecule/RhIT} - E_{RhIT} - E_{Molecule}$

 $\tau = \nu^{-1} e^{-E_{ads}/kT}$

در رابطهی بالا E_{Molecule}، و E_{Molecule/Rhit} به ترتیب انرژی کل مولکول SO₂ تنها، سطح RhIT و سطح RhIT و سطح RhIT مو مطلحی بالا مولکول در رابطه زیر محاسبه شد: همراه با مولکول جذب شده است. برای بررسی کارایی سطح به عنوان حسگر زمان بازآرایی، r، از رابطهٔ زیر محاسبه شد:

> (۲) در این رابطه، T و k به ترتیب دما و ثابت بولتسمان هستند و u فرکانس عمل است.



۳- بحث

مولکول SO2 به طور عمودی و افقی روی تمام جایگاههای مختلف سطح RhIT قرار داده شد. پس از بهینه شدن ساختارهای پیشـنهادی، مطلوب ترین جایگاه برای جذب SO2 بر روی سـطح با انرژی جذب v eV-- تعیین شـد. در پلیدار ترین پیکربندی، مولکول SO2 به صورت موازی با سطح بالای اتم Rh قرار گرفته است (شکل ۱). فاصله یمولکول SO2 تا سطح در بهترین پیکربندی، Å ۲/۰۰ است. بعد از جذب مولکول روی سطح، میانگین طول پیوندهای SO- S- SO2 تا سطح در Å ۱۰/۰۰ ۱۰/۰۰ افزایش و همچنین زاویه پیوندی O-S-O پس از جذب نسـبت به مولکول آزاد، [°]۰/۰۰ کاهش یافته است. محاسبات آنالیز جمعیت نشان داد که در طی فرایند جذب، معادل P ۲/۰ بار از سطح به مولکول جذب شونده منتقل شده است. زمان بازآرایی محاسبه شده در دمای اتاق ۲۳/۹ ۲۳ است که برای کاربرد سطح به عنوان یک حسگر مقدار مناسبی است.



شکل ۱ :الف) نمای از بالا و از روبروی برای پیکربندی با کمترین انرژی از ساختار RhIT/SO2، ب) نمودار اختلاف چگالی بار در طی فرایند جذب. رنگ سبز انباشتگی و رنگ قرمز کاهش چگالی بار را برای همسطح e/Å³ ۰/۰۰۷ نشان میدهد و ج) چگالی حالتهای جزیی برای این ساختار

نمودار PDOS برهمکنش مؤثر سطح با مولکول SO2 را نشان می دهد (شکل ۱). پیکهای مربوط به اوربیتالهای p مولکول جذب شده درنواحی انرژی مختلف، از جمله در محدوده V ۳۸– تا ۱/۷– با اوربیتالهای b و p سطح همپوشانی دارند. پیکهای مربوط به اوربیتالهای p سطح در بازهٔ انرژی V ۲/۱۰– تا ۳/۹– پس از جذب پهن تر شده اند. همچنین، پیکهای مربوط به اوربیتالهای b سطح، در نزدیکی فرمی به سمت انرژی های مثبت جابجا شده اند. نمودار توزیع اختلاف چگالی بار (CDD) کاهش چگالی بار روی سطح و انباشتگی بار روی مولکول SO2 را نشان می دهد که با نتایج مربوط به تجزیه و تحلیل جمعیّت مطابقت دارد. علاوه بر این، انباشتگی بار در ناحیه مابین سطح و مولکول جذب شده، برهمکنش موثر بین سطح و مولکول SO2 را توجیه می کند.

۹- نتیجهگیری

eV در این پژوهش جذب مولکول SO₂ روی سطح RhIT با محاسبات DFT بررسی شدهاست. انرژی جذب بهینهٔ معادل p ۲۰/۷۸ - نشاندهنده برهمکنش مناسب این مولکول با این سطح است. نمودار PDOS، همپوشانی پیکهای اوربیتالهای p مولکول جذبشده با پیکهای مربوط به اوربیتالهای p و d سطح را، در بازهٔ وسیعی از انرژی نشان میدهد. تجزیه و تحلیل جمعیت، انتقال بار از سطح را نشان داد که با نمودار CDD مطابقت دارد. انرژی جذب مناسب و زمان بازآرایی کم بیانگر این است که سطح RhIT میتواند حسگر مناسبی برای گاز SO₂ باشد.

منابع و مراجع

[1] Mortazavi, B., Shahrokhi, M., Makaremi. (2018). First-principles investigation of Ag-, Co-, Cr-, Cu-, Fe-, Mn-, Ni-, Pd-and Rh-hexaaminobenzene 2D metal-organic frameworks. Materials today energy, 10, 336-342.

[2] Zergani, F., & Tavangar, Z. (2022). Gas sensing behavior and adsorption mechanism on χ3 borophene surface. Chemical Engineering Journal, 431, 133947.

[3] Delley, B. (1990). An all-electron numerical method for solving the local density functional for polyatomic molecules. The Journal of chemical physics, 92(1), 508-517.



استخراج خواص ترمودینامیکی تعادلی و غیر تعادلی برای حالت گازی سیستم Zn...H2 از روی سطح انرژی پتانسیل بین مولکولی سه بعدی کوانتومی

عاطفه اكبر پور'، ابراهيم نعمتي كنده

دانشجو، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه ارومیه ۱- دانشیار ، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه ارومیه، رایانامه: e.nemati@urmia.ac.ir ۲- دکتر، رشته فیزیک ماده چگال، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه

واژگان کلیدی: PES; ZN_H2 ;وان دروالس، شبیه سازی مکانیک کوانتومی، خواص آسایش

۱–مقدمه

۲-روش انجام محاسبات

در این پژوهش، در این مقاله، رویکردهای محاسباتی جدیدی، از جمله تصحیح BSSE به روش بویز و برناردی، مورد بررسی قرار گرفته است. برای انتخاب بهترین روش محاسباتی با دقت و هزینه مناسب، پتانسیلهای بینمولکولی به طور جامع برای زوایای (3, 20, 135) R = (2.00-15.00 Å) و ۵۰ فاصله مختلف در بازه ی (A از 2.00-15.00 R = (2.00-15.00 Å) و ۵۰ فاصله مختلف در بازه ی (A از 2.00-15.00 R = (2.00-15.00 Å) و ۵۰ فاصله مختلف در بازه ی (A از 2.00-15.00 R = (2.00-15.00 Å) و ۵۰ فاصله مختلف در بازه ی (A از 2.00-15.00 R = (2.00-15.00 Å) و ۵۰ فاصله مختلف در بازه ی (A از 2.00-15.00 R = (2.00-15.00 Å) و ۵۰ فاصله مختلف در بازه ی (A از 2.00-15.00 R = (2.00-15.00 Å) و ۵۰ فاصله مختلف در بازه ی (A از 2.00-10.00 R + 10.00 R



شکل۳) پیکر بندی کمپلکسZn_H2 شکل۴) محاسبات پتانسیل بین مولکولی از روش Zn_H2 شکل۳)

۳-بحث و نتايج

پتانسیلهای محاسبه شده به صورت *ab-initio* با مدلهای پتانسیل لنارد-جونز (۱۲، ۶) و مورس برازش داده شدند، که به طور کلی پتانسیلهای برهم کنش دو جسمی هستند. به عبارت دیگر، سطح انرژی پتانسیلی به عنوان مجموعه ای از برهم کنش های دو جسمی از نوع *Zn...H* در نظر گرفته شده است. (1)

$$U(r,\theta) = \sum_{\substack{i,j\\i\neq j}} V(r_{i,j}) + \varepsilon$$

در اینجا، *V(r_{ij})* مدل پتانسیل (لنارد-جونز (۱۲، ۶) یا مورس) است و ۶ نشاندهنده خطایی است که از ناسازگاری بین پتانسیلهای برازش شده و پتانسیلهای *ab-initio* ناشی می شود. نتایج برازش با استفاده از مدلهای وشیشتا، مورس و لنارد-جونز (۱۲، ۶) به ترتیب در شکلهای ۳، ۴ و۵ نشان داده شدهاند. برازش ضعیف هر دو مدل، به ویژه لنارد-جونز (۱۲، ۶)، از این شکلها آشکار است که می توان آن را به تعداد کم پارامترهای برازش و همچنین حذف برهم کنش های سهجسمی نسبت داد.



۴-نتیجه گیری

یک مدل پتانسیل ab-initio برای کمپلکس Zn...H2 (vdW) محاسبه شد و سپس دادههای ab-initio برای یافتن پتانسیلهای (LJ(12,6) مورس و واشیشتا استفاده شدند. نتایج به دست آمده از هر دو مدل دوجسمی به دلیل حذف تعاملات سهجسمی ضعیف





ساخت توری استیل با سطح آبگریز با استفاده از کند و سوز لیزری با هدف جداسازی نفت از آب

فائزه امیدعلی'، سعید عزیزیان'، بهشته سهرابی"

 ۱ - نویسنده مسئول : دانشجوی دکتری تخصصی، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه بوعلی همدان، <u>f.omidali@che.basu.ac.ir</u>
 ۲- استاد، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی دانشگاه بوعلی همدان، sazizian@basu.ac.ir
 ۳- دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، sohrabi_b@iust.ac.ir

واژگان کلیدی: فوق آبگریز، فوق چربیدوست، استئاریل الکل، لیزر فمتو ثانیه.

۱– مقدمه

آلودگی نفتی تهدید مهمی در زیستبوم دریایی و برای سلامت انسان به حساب آمده و نیاز به روشهای مؤثری برای جداسازی نفت از آب دارد. تکنیکهای جداسازی مرسوم اغلب با چالشهایی مانند هزینهٔ بالا، ناکارآمدی و آلودگی ثانویه مواجه هستند. امروزه محققان به دنبال روشهای جدید و نوآورانه، از جمله سطحهایی با ترشوندگی قابل کنترل که با الهام از پدیدههای طبیعی ساخته می شوند، هستند. دستیابی به آب گریزی این سطحها نیازمند ایجاد زبری از طریق ساختارهای میکرو و نانو و استفاده از مواد با انرژی سطحی کم است [۱٫۲]. در این مطاعه، برای ایجاد سطحی با آب گریزی بالا، توری فولادی با استفاده از کند وسوز لیزری و سپس با استئاریل الکل اصلاح شد. به منظور بررسی این تغییرها زاویه تماس آب روی این سطح بررسی شد. همچنین کاربردهای عملی این سطح مانند جداسازی نفت از آب و مقاومت در برابر خوردگی مورد ارزیابی قرار گرفت که ظرفیت بالای

۲- روش

برای ایجاد یک سطح بسیار آبگریز و فوق چربیدوست، توری فولادی با کند و سوز لیزری(جهت افزایش زبری) و سپس استئاریل الکل از لحاظ ساختاری و انرژی سطح اصلاح شد. به این منظور پس از اصلاح با لیزر، سطحها شسته شده و به مدت ۲۴ ساعت در محلول استئاریل الکل غوطهور شد. این اصلاح شیمیایی سبب کاهش انرژی سطحی و بهبود آبگریزی و چربی-دوستی سطح می گردد.

۳- بحث

به منظور بررسی و توصیف تغییرات ساختاری سطح مورد بررسی، تصاویر FE-SEM تهیه شد. همانطور که در شکل ۱-الف مشاهده می شود در نمونه اولیه توری، تمام رشتهها کاملا صیقلی و بدون پستی بلندی هستند. پس از کند و سوز لیزری، ایجاد زبری روی سطح کاملا قابل مشاهده است (شکل ۱-ب). این زبری ناشی از ذوب موضعی و اکسیداسیون در سطح استیل بوده



که سبب بهبود ویژگیهای ترشوندگی سطح میشود. شکل ۱-پ پس از اصلاح شیمیایی است که به خوبی شکلگیری ساختارهای ورقهای استئاریل الکل را در سطح و منافذ آن نشان میدهد.



شکل ۱- FE-SEM سطح توری فولادی قبل (الف) و بعد (ب) از کند و سوز لیزری و همچنین بعد از اصلاح شیمیایی با استئاریل الکل (پ).

شکل ۲ زاویه تماس سطحها با قطره آب را نشان میدهد که روی توری فولادی اصلاح نشده برابر با °۸۳/۲۵ است و در دسته سطحهای آبدوست قرار میگیرد. زاویه تماس سطحها پس از اصلاح لیزری و شیمیایی به ترتیب به °۹۸/۱۹ و °۱۳۳/۷۱ افزایش مییابد که نشان از تغییر قابل قبول ترشوندگی سطح است.



شکل ۲- زاویه تماس قطره آب روی سطح توری فولادی قبل (الف) و بعد (ب) از اصلاح با لیزر و همچنین بعد از اصلاح با استئاریل الکل(پ).

برای بررسی عملکرد توری اصلاح شده در جداسازی نفت از آب، این سطح در ابعاد ۴ در ۴ سانتیمتری روی بشر قرار گرفت و مخلوطی از نفت و آب روی آن ریخته شد. همانطور که در شکل ۳ مشخص است، جداسازی نفت و آب بطور کامل انجام شده است.



شکل ۳– جداسازی آب و نفت سفید با استفاده از توری فولادی اصلاح شده با لیزر و استئاریل الکل قبل (الف) و بعد (ب و پ) از فرایند جداسازی. با توجه به اینکه، یکی از کاربردهای توری آماده شده، جداسازی نفت از آب در محیطهای دریایی است، میزان خوردگی این سطح در محیط خورنده محلول سدیم کلرید ۳/۵ درصد وزنی بررسی شد. همانطور که در شکل ۴ پیداست، لیزر سبب افزایش خوردگی و استفاده از استئاریل الکل به عنوان اصلاح کننده شیمیایی سبب کاهش خوردگی تا ۷۲/۶ درصد میشود.

دانسکاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ تان ۱۴۰۳



شکل ۴- نمودارهای تافلی بررسی خوردگی توری فولادی قبل (ب) و بعد (الف) اصلاح ساختاری با لیزر و بعد از اصلاح شیمیایی با استئاریل الکل (پ).

۴- نتیجهگیری

در این تحقیق با استفاده از توری فولادی ارزان قیمت و در دسترس، سطحی با آبگریزی بالا برای جداسازی نفت از آب ساخته شد. به این منظور اصلاح سطح با کند و سوز لیزری و استئاریل الکل که ماده شیمیایی سبز و دوستدار محیط زیست و جایگزین مناسبی برای اصلاح کنندههای سمی است، انجام شد. این سطح عملکرد بسیار مناسب و امیدوارکنندهای را در جداسازی نفت از آب و بازدارندگی خوردگی از خود نشان داد.

منابع و مراجع

S. Rahimi, S. Azizian, and H. Tahzibi, Colloids Surf A Physicochem Eng Asp 695, 134287 (2024).
 E. Mosayebi, S. Azizian, B. J. Cha, T. G. Woo, and Y. D. Kim, Journal of Physics and Chemistry of Solids 150, 109815 (2021).



۱ - دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه سرامیک، دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی *amirsardari253@gmail.com* ۲و *- نویسنده مسئول: دانشیار ، گروه سرامیک، دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی شیراز، *mashreghi@sutech.ac.ir*

واژگان كليدى: فيلم لايەنازك، تلوريد كادميوم، سلول خورشيدى

۱–مقدمه

لایهنازک تلورید کادمیوم کاربرد گستردهای در سلولهای خورشیدی لایهنازک دارد (اوجو،۲۰۱۹). روشهای مختلفی برای لایه نشانی این ماده ارائه شده است که از آن میان میتوان به روشهای تبخیر در خلأ، اسپاترینگ، اسپریکردن و لایه نشانی الکتروشیمیایی اشاره کرد. از مزایای لایه نشانی الکتروشیمیایی میتوان به هزینه کم، سادگی تولید، تجهیزات ارزانقیمت و بازده لایه نشانی بالا اشاره کرد (باسول،۱۹۹۸). در این مقاله به لایه نشانی الکتروشیمیایی تلورید کادمیوم در حمام لایه نشانی اسیدی پرداخته میشود و نتایج حاصل ارائه می گردد.

۲- روش

حمام لایه نشانی متشکل از محلول آبی 1 مولار سولفات کادمیوم و محلول اشباع دی اکسید تلوریوم در pH = 2.8 بود. شیشه پوشیده با اکسید قلع آلاییده به فلوئور (FTO) بهعنوان کاتد و میله گرافیت بهعنوان آند انتخاب شد. لایه نشانی در دمای 70 درجه سانتیگراد، دور همزن 1400rpm و ولتاژ 1600mv به مدت 4 ساعت انجام شد. ضخامت لایه ایجاد شده از تصویر سطح مقطع میکروسکوپی نمونه که در شکل 1 (الف) آمده است تعیین گردید. همانطور که در شکل مشخص است، ضخامت لایه تلورید کادمیوم حاصل 600nm است. تصویر میکروسکوپی از سطح نمونه در شکل 1 (ب) آمده است. همانطور که مشخص است لایه حاصل عاری از هرگونه حفره بوده وکاملا یکنواخت است. اندازه دانه ها کمتر از 100nm تخمین زده می شود.



برای تعیین استوکیومتری بودن پوشش حاصل، طیف EDS پوشش حاصل اندازه گیری شد که نتیجه آن در شکل 2 آمده است. از جدول درصد عناصر که در این شکل آمده است، غلظت کادمیوم در پوشش تلورید کادمیوم حاصل برابر با %48.6 و غلظت تلوریوم %51.4 به دست آمد که در نتیجه آن نسبت اتمی کادمیوم به تلوریوم برابر با 0.95 به دست می آید. این نشان دهنده آن است که ترکیب پوشش حاصل بسیار نزدیک به ترکیب استوکیومتری است.



شکل ۲: EDS در بزرگنمایی 500X

۳- نتیجه گیری

با روش لایه نشانی الکتروشیمیایی لایهنازک تلورید کادمیوم ساخته شد. لایه نشانی درحمام اسیدی و در دمای ۷۰درجه سانتیگراد و ولتاژ 1600mv انجام شد. لایه نشانی به مدت 4 ساعت منجر به پوشش تلورید کادمیوم باضخامت 600nm گردید. نسبت اتمی کادمیوم به تلوریوم در پوشش حاصل 0.95 به دست آمد که نشاندهنده استوکیومتری بودن ترکیب پوشش حاصل است.



منابع و مراجع

 Ojo, A. A., Cranton, W. M., & Dharmadasa, I. M. (2019). Next generation multilayer graded bandgap solar cells. Cham: Springer International Publishing.
 Basol, B. M. (1988). Electrodeposited CdTe and HgCdTe solar cells. Solar Cells, 23(1-2), 69-88.



بررسی برهمکنش داروی کلرومتین با نانو متخلل کوکوربیت {۶}اوریل به روش محاسبات کوانتومی و نظریه تابع چگالی

اشکان باقری، مهدی رضایی صامتی

ashkanbagherichemist@gmail.com، دانشکده علوم پایه،دانشگاه ملایر mrsameti@malayeru.ac.ir دانشگاه ملایر

واژگان كليدى:كلرومتين،كوكوربيت {۶}اوريل،نظريه تابع چگالى،گوسين ۹۰

۱–مقدمه

در پژوهش حال حاضر جذب و برهمکنش بین داروی ضدسرطانی کلرومتین و نانومتخلل کوکوربیت {۶}اوریل خالص به روش نظریه تابع چگالی در سطح محاسباتی ((Cam-B3LYP/ 6-311G(d)) توسط نرم افزار گوسین ۰۹، به منظور دارورسانی بررسی شده است.نتایج انرژی جذب و پارامترهای آنتالپی و انرژی آزاد گیبس نشان داد،برهمکنش بین دارو و نانومتخلل به لحاظ ترمودینامیکی مساعد و گرمازا می باشد.

۲-معرفی

کلرومتین با نام تجاری موستارژن یک داروی ضد سرطان و یک عامل آلکیله کننده است که با متوقف کردن تولید پروتئین های لازم از رشد سلولهای سرطانی و تولید مثل آنها جلوگیری مینماید. داروی کلرمتین برای درمان نوعی سرطان به نام لنفوم هوچکینی و لوسمی استفاده میشود. کوکوربیت {۶}اوریل مولکول درشتحلقهای می باشد که از مونومرهای گلیکولاوریلی ساخته شدهاست که توسط پلهای متیلن به هم متصل شدهاند و ساختار مناسبی را بعنوان یک حامل دارو تشکیل داده است.

۳-روش محاسبات

در این مطالعه، تمامی پیکربندیهای داروی ضد سرطان کلرومتین با کوکوربیت در نظر گرفته شده و تمامی ساختارها در سطح نظریه عملکردی چگالی ((Cam-B3LYP/ 6-311G(d))) با استفاده از نرمافزار گوسین(۹۰) بهینهسازی شدهاند.(شکل۱) انرژی برهمکنش، انرژی تغییر شکل، پارامترهای ترمودینامیکی، انرژیهای HOMO-LUMO، نمودارهای چگالی حالتها ((DOS) و پارامتر گرادیان چگالی (RDG) برای همه پارامترهای در نظر گرفته شده محاسبه می شوند.



۴-نتايج و بحث

نتایج محاسبه شده نشان می دهد که فرآیند جذب داروی کلرومتین با کوکوربیت {۶}اوریل گرمازا و خودبه خودی است. نتایج انرژی های جذب نشان می دهد که اتصال داروی کلرومتین با کوکوربیت {۶}اوریل در موقعیت ۳ نسبت به دوموقعیت دیگر قوی تر است. نمودارهای چگالی حالت (DOS) (شکل ۲) نشان می دهد که خواص الکتریکی کلرومتین با کوکوربیت {۶}اوریل به طور قابل توجهی تغییر می کند، بنابراین اثرات دارو بر کوکوربیت ملموس تر است و واکنش پذیری کمپلکس های مورد مطالعه افزایش می یابد که نشان می دهد کوکوربیت می تواند حامل مناسبی برای داروی ضد سرطان کلرومتین باشد.همچنین با توجه به بررسی گرادیان چگالی (RDG)(شکل ۳) مشخص شد که پیوند بین دارو با کوکوربیت {۶}اوریل به دلیل وجود سهم بیشتری از پیوندهای الکترواستاتیک در موقعیت ۳ ، کاندیدای مناسب تری برای دارورسانی (حمل دارو) و سپس تحویل آن در سلول هدف می باشد.اما در دوموقعیت دیگر باتوجه به افزایش سهم پیوند واندروالسی،به منظور فرآیند رهایش و جداسازی دارو و اتصال به سلول هدف می تواند موفق تر عمل کنند.

جدول ۱:مقادیر انرژی جذب،آنتاپی و انرژی آزاد گیبس داروی کلرومتین با کوکوربیت {۶}اوریل در سه موقعیت

موقعیت های جذبی	انرژی جذب	آنتالپی	انرژی آزاد گیبس
موقعیت ۱	-۲۵/۱۴	$-1\Delta/\cdot V$	-18/2+
موقعيت ٢	$-\Upsilon\lambda/\Upsilon\Upsilon$	-17/17	- T +/+ A
موقعيت ٣	- ۴ ۲/۷・	-78/14	-29/18



شکل ۲:تصاویر گرادیان چگالی (RDG) داروی کلرومتین با کوکوربیت {۶}اوریل در سه موقعیت

۵-نتیجه گیری

این مطالعه نشان می دهد با توجه به نتایج بدست آمده از پارامترهای محاسبه شده،جذب داروی کلرومتین بر کوکوربیت کاملا مطلوب و مساعد بوده همچنین پیوند قوی بین این دو برقرار می شود که می تواند این کمپلکس را ترکیب ایده آلی به منظور پروژه دارورسانی و حمل دارو برای داروسازان مبدل کند.

منابع و مراجع

[1] Bower M., Waxman J., Lecture Notes: Oncology (2 ed.). John Wiley & Sons. (2017)

[2] ML Jones ; British Journal of Healthcare Assistants, (2023) - Mustard gas: out of hate comes hope.

[3] "Adult Hodgkin Lymphoma Treatment (PDQ) - Patient Version". NCI. August 3, (2016).

[4] Mostafa A. Abdel-Maksoud; (2023) Advances in Autoimmune Rheumatic Diseases Translational Immunology, Pages 333-348.

[5] YUNING W.; (2023). Cancer Research, Chemotherapy's hidden origins

[6] Therapeutic Goods Administration (*TGA*). 30 June 2021. Archived from the original on 5 September 2021. Retrieved 5 September 2021.



مطالعه نظری اثرات مشارکتی و استخلاف بر خواص پیوندهای تترل و هیدروژنی در کمپلکسهای سه جزئی X-Ph-CN:SiF4:HF

ستوده باقری ' ،حمیدرضا مسعودی' ، محسن اباذری'

۱ - دانشیار، رشته تخصصی شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان، (S.Bagheri@vru.ac.ir) ۲ - دانشیار، رشته تخصصی شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان، (H.R.Masoodi@vru.ac.ir) ۳- کارشناسی ارشد شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان (mohsenabazaeri69@gmail.com)

واژگان كليدى: مشاركتى، پيوند تترل، پيوند ھيدروژنى، اثرات استخلاف، ثابتھاى ھامت

۱– مقدمه

تاثیرات متقابل برهمکنشهای غیرکووالانسی بر یکدیگر توجهات ویژهای را به خود جلب کرده است. این پدیده را اثرات مشارکتی میگویند. در صورتی که حضور دو برهمکنش باعث تقویت همدیگر شوند آن را همافزایی و در صورتی که همدیگر را تضعیف کنند مخالفت کنندگی میگویند. در سال ۱۹۵۷ برای اولین بار مفهوم مشارکتی پیشنهاد شد [۱]. مفهوم مشارکتی به توضیح رفتار سیستمهای دارای پیوندهای هیدروژنی کمک بسیار میکند [۲و۳].

۲- روشهای محاسباتی

محاسبات مکانیک کوانتومی با استفاده از نرم افزار Gaussian09 در سطح MP2/6-311+++G(d,p) انجام شده است. به منظور تصحیح خطای انطباق مجموعه پایه بر مقادیر انرژی، از روش نیروی مقاوم در طی فرآیند بهینه سازی استفاده شده است. همچنین، خواص مکان شناختی چگالی الکترونی با استفاده از روش اتمها در مولکولها توسط نرمافزار AIM2000در همان سطح محاسباتی محاسبه شده است.

۳- بحث و بررسی نتایج

طرح شماتیک ساختارهای مورد بررسی در شکل ۱ نشان داده شده است. انرژی تشکیل کمپلکسهای سه جزئی از رابطه زیر محاسبه می شود:

(1)

 $\Delta E_{ternary} = E_{ternary} \text{-} \sum E_{mon}$

Eternary و Emon به ترتیب مربوط به انرژی کمپلکس و مونومرهای بهینه شده است. جدول ۱ نشان میدهد که مقادیر انرژی تشکیل کمپلکس در همه سیستمهای سه جزئی مورد بررسی منفی است که نشان دهنده پایداری ساختارهای مورد بررسی است. با رفتن از قویترین استخلاف الکترون دهنده، مقدار مطلق انرژی تشکیل است. با رفتن از قویترین استخلاف الکترون کشنده به سمت قویترین استخلاف الکترون دهنده، مقدار مطلق انرژی تشکیل کمپلکس وجود دارد.



جدول ۱: پارامترهای انرژی و مقادیر دانسیته الکترونی در نقاط بحرانی پیوندها در ساختارهای استخلاف دار شده در موقعیت متا (داخل پرانتز) و پارا

X or X'	ΔE _{ternary} /kJ mol ⁻¹	Ecoop/kJ mol ⁻¹	E'sin /kJ mol ⁻¹	E'HF /kJ mol ⁻¹	ρ sin / a.u	ρ н…ғ ∕а.u
NO ₂	-77/24(-77/49)	-4/19(-4/11)	-14/7(-14/•7)	-17/84(-17/08)	•/••٨١١(•/••٧٩)	•/•1433(•/•1473)
Cl	-74/89(-74/10)	-4/94(-4/54)	-10/94(-10/84)	-18/89(-17/89)	·/··٩·٧(·/··٨۶)	•/•1444(•/•1464)
F	-24/22(-24/12)	-۴/٩٩(-۴/٨۶)	-18/68(-10/84)	-17/44(-17/71)	·/··A9Y(·/··AY)	•/• 1477(•/• 1427)
Н	-70/74(-70/74)	$-\Delta/\Psi V (-\Delta/\Psi V)$	-18/49(-18/49)	- 1 Ψ/λΥ (- 1 Ψ/λΥ)	•/••91۵(•/••91)	•/• 1484(•/• 1484)
CH3	-۲۵/۵۱(-۲۵/۷۳)	$-\Delta/ \nabla \Lambda (-\Delta/\Delta \Lambda)$	$-1Y/\cdot\Delta(-1Y/YY)$	-13/22(-14/•4)	•/••945(•/••94)	•/• ١٤٨٥(•/• ١٤٨٧)
NH ₂	- 18/18(- 18/14)	$-\mathcal{F}/1\cdot(-\Delta/\mathbf{V}\Delta$)	-18/4.(-18/89)	-14/08(-14/5.)	·/· \ · · ۵(·/· · ۹۷)	·/· \۵\۵(·/· \۵·٣)

۴–نتیجهگیری

نتایج نشان میدهد که افزایش در قدرت الکترون کشندگی استخلافها همراه با کاهش مقدار مطلق انرژی تشکیل کمپلکس است. مقدار منفی E_{coop} بیانگر اثر مطلوب پیوندهای تترلی و هیدروژنی مورد نظر بر روی یکدیگر است. اثرات استخلاف بر مشارکت پذیری پیوندهای تترلی و هیدروژنی مورد بررسی از طریق ثابتهای هامت قابل بیان است.

منابع و مراجع

[1] Huyskens, P. L. (1977). Factors governing the influence of a first hydrogen bond on the formation of a second one by the same molecule or ion. Journal of the American Chemical Society, 99(8), 2578-2582.

[2] Nochebuena, J., Cuautli, C., & Ireta, J. (2017). Origin of cooperativity in hydrogen bonding. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(23), 15256-15263.

[3] Bagheri, S., Masoodi, H. R., & Yousofvand, A. (2016). Exploring the role of substituents on cooperativity between N··· HF and CH··· F hydrogen bonds in ternary systems involving aromatic azine: substituted complexes of s-triazine: HF: s-triazine as a working model. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1092, 12-18.



تاثیر تعداد حلقههای آروماتیک بر اثر مشارکتی بین برهمکنشهای CH...π و N...πدر حلقه پیرازین

ستوده باقری'،حمیدرضا مسعودی'، زهرا خواجه نظامی"

۱ و * - دانشیار، رشته تخصصی شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان، (S.Bagheri@vru.ac.ir) ۲- دانشیار، رشته تخصصی شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان، (H.R.Masoodi@vru.ac.ir) ۳- کارشناسی ارشد شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان (khajehnezami.zahra@yahoo.com)

واژگان کلیدی: پیوند هیدروژنی، پیوند پینکوژنی، اثر مشارکتی، پیرازین

۱– مقدمه

اثر مشارکتی به عنوان افزایش قدرت پیوند اولیه به وسیله تشکیل پیوند دیگری با مولکول دهنده یا مولکول پذیرنده شرکت کننده در تشکیل پیوند اولیه در نظر گرفته میشود. مفهوم مشارکتی برای اولین بار در سال ۱۹۵۷ مطرح شد [۱]. اثر مشارکتی بین برهمکنشهای پیوند پنیکوژنی با برهمکنشهای دیگر مورد مطالعه قرار گرفته است [۲و ۳]. در این پژوهش، اثر مشارکتی بین برهمکنشهای π....π و ۲۰۰۰۰ در کمپلکس HCN...pyrazine...HCN به صورت نظری بررسی شده است. اثر تعداد حلقههای آروماتیک بنزن بر اثر مشارکتی این برهمکنشها در حلقه پیرازین مورد مطالعه قرار گرفته

۲- روشهای محاسباتی

محاسبات مکانیک کوانتومی با استفاده از نرم افزار Gaussian09 در سطح MP2/6-311++G(d,p) انجام شده است. از آنجایی که هدف از این تحقیق، بررسی اثر مشارکتی بین برهمکنشهای CH...π و m. است، در طی فرایند بهینهسازی محدودیت تقارنی اعمال شده است. همچنین، خواص مکان شناختی چگالی الکترونی با استفاده از روش اتمها در مولکولها در سطح MP2/6-311++G(d,p) توسط نرمافزار AIM2000 محاسبه شده است.

۳- بحث و بررسی نتایج

طرح شماتیک ساختارها در شکل ۱ نشان داده شده است. انرژی تشکیل کمپلکس سه جزئی از رابطه زیر محاسبه می شود: ∆E_{ternary} = E_{ternary}-∑E_{mon} و E_{ternary} به ترتیب مربوط به انرژی کمپلکس و مونومرهای بهینه شده است. نتایج جدول ۱ نشان میدهد که تشکیل

رمسته از معشد به از با به ازراع الله الفرایش تعداد حلقهها میزان پایداری کمپلکس افزایش می یابد. کمپلکس های مربوطه مطلوب است. همچنین با افزایش تعداد حلقهها میزان پایداری کمپلکس افزایش می یابد.



n	ΔE _{ternary} /KJ mol ⁺	Ecoop/KJ III01	$\Delta E'_{CH\pi}/KJ mol^{-1}$	$\Delta E'_{N\pi}/KJ \text{ mol}^{+}$	рснπ/ а.u	ρ _{Nπ} /a.u
•	-11/202	$- \mathbf{\tilde{r}} / \mathbf{\hat{s}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}$	$-\mathbf{V}/\mathbf{Y}$) ۹	-X/WT •	•/••۶۵	•/••۶۴
١	- <i>\۶</i> /٧٩٣	-۴/۵۲ ۴	- \ • /V٣ •	- \ • /۵۸۸	•/••٧۴	•/••*
٢	-19/871	-۲/۹۴۱	-11/٣・1	-11/781	•/••٧۶	•/••٨١
٣	- \ 9/۶۷۷	_ T / F ۶ F	-11/221	-11/222	•/••٧۶	•/••*

نتایج نشان میدهد که رابطـه خطی مستقیمی بین مقادیر ρ_{CH...π} و رابطه مرتبه دوم خوبی بـین مقـادیر ρ_{N...π} و رابطه مرتبه دوم خوبی بـین مقـادیر ρ_{N...π}

۴- نتیجهگیری

برهمکنشهای CH…π و N… در کمپلکسهای سه جزئی به طور همزمان باعث افزایش قدرت یکدیگر میشوند. افزایش در تعداد حلقههای آروماتیک در تمامی ساختارهای مورد بررسی با افزایش مقادیر دانسیته الکترونی در نقاط بحرانی پیوندهای CH…πو N… همراه است. روابط معناداری بین مقادیر دانسیته الکترونی و انرژی هر پیوند وجود دارد.



منابع و مراجع

[1] Huyskens, P. L. (1977). Factors governing the influence of a first hydrogen bond on the formation of a second one by the same molecule or ion. Journal of the American Chemical Society, 99(8), 2578-2582.

[2] Esrafili, M. D., Vakili, M., & Solimannejad, M. (**2014**). Cooperative effects in pnicogen bonding:(PH2F) 2–7 and (PH2Cl) 2–7 clusters. Chemical Physics Letters, 609, 37-41.. Elements of physical chemistry. Oxford University Press, USA.

[3] Esrafili, M. D., Mohammadian-Sabet, F., & Solimannejad, M. (2015). Mutual influence between anion– π and pnicogen bond interactions: The enhancement of P… N and P… O interactions by an anion– π bond. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 57, 99-105.



مطالعه نظری ساختار الکترونی و طیف الکترونی کمپلکس کوئوردیناسیونی [Co^{III}(Salophen)(NH₃)2]⁺

اكبر بختيارى

استادیار، شیمی معدنی، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی ۴۶۹۲–۱۹۳۹۵، تهران، ایران akbar.bakhtiari@pnu.ac.ir -(Email) bakhtiari.a1@gmail.com

واژگان كليدى: كمپلكس كبالت (٣+)، ليگند شيف باز، ليگند محورى، ساختار الكترونى، طيف الكترونى، مطالعه DFT

۱– مقدمه

کمپلکسهای فلزات واسطه با لیگاندهای شیف باز مختلف، به دلیل کاربردهای بالقوه در زمینههای بیوشیمی آلی، کاتالیز همگن و مغناطیس مولکولی، همواره مورد توجه بودهاند (برای مثال: Asraf, 2019). کمپلکس های شیف باز کبالت (III) برای شبیه سازی و مطالعه مولکول های بیولوژیکی در سیستمهای زنده استفاده شدهاند. پس از کشف خواص ضد ویروسی برخی از کمپلکسهای شیف باز کبالت (III)، بررسیهای متعددی در زمینه برهمکنش یون (3+) Co با پروتئینها و اسیدهای نوکلئیک انجام شده است (Baniyaghoob, 2009). از آنجا که کمپلکسهای کبالت (۳+) با لیگاندهای محوری فعالیت بیشتری از خود نشان می دهند، احتمالا تشکیل پیوندهای کوئوردیناسیونی محوری بین کبالت (۱۱۱) و مولکولهای بیولوژیکی هدف، در مکانیسم عمل دخیل باشد. در کار پژوهشی حاضر، ساختار مولکولی و الکترونی کمپلکس کبالت (۳+) با لیگاندهای معوری فعالیت بیشتری از OFT) و آمینهای محوری به مروی در سایسیایدن)–۱و۲-فنیلندی آمین) و آمینهای محوری با محاسبه انرژیهای انتقالهای الکترونی کمپلکس با روش نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان (TDDFT) در فاز گازی بررسی میشود. خطهای طیفی محاسبه شده در ناحیه نور مرئی و موارای بنفش، بر اساس ساختار الکترونی کمپلکس موار می می می محود. خطهای طیفی محاسبه شده در نات کرونی محاسبه شده در نات اسان ساختار مولکولی و الکترونی کمپلکس کبالت (۳) به روش نظریه تابعی چگالی

۲- روش محاسبات

محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) برای کمپلکس در حالت گازی آزاد با استفاده از نرم افزار 09 (DFT) نسخه A.02 در سطح تئوری B3LYP نجای نظریه تابعی چگالی (DFT) برای محدودیت در سطح تئوری B3LYP نجام شده است. ساختار مولکولی کمپلکس مورد بحث در حالت آزاد گازی و بدون اعمال محدودیت های تقارنی بهینه سازی شده است. در این محاسبات، برای عناصر C، H، P و O از مجموعه پایه (basis set) (d,p) (basis set) و مرم اوربیتال های مولکولی با استفاده از نرم افزار e O از مجموعه پایه (basis set) (d,p) و C از مجموعه پایه (basis set) (d,p) و c مورد اتم و C از مجموعه پایه (basis set) (d,p) استفاده از نرم افزار e O از مجموعه پایه (basis set) (d,p) استفاده از نرم افزار e O از مجموعه پایه (basis set) (d,p) و c مورد اتم co از محموعه پایه (basis set) استفاده از نرم افزار e O از مجموعه پایه (basis set) (d,p) و c مورد اتم co از مجموعه پایه (basis set) (d,p) و c o از مجموعه پایه (basis set) (d,p) (d,p) و c o از مجموعه پایه (basis set) (d,p) و c o از مجموعه پایه (basis set) (d,p) (d,p) و c o از مجموعه پایه (basis set) (d,p) (d,p) و c o از مجموعه پایه (basis set) (d,p) (d,p) و c o از مجموعه پایه (basis set) (d,p) (d,p) و c o از محموعه پایه (basis set) (d,p) (d,p) و c o از محموعه پایه (basis set) (d,p) (d,p) و c o از محموعه پایه (b,p) (d,p) (d,p)



۳- نتايج و بحث

در ساختار مولکولی بهینه شده کمپلکس ⁺[Co^{III}(Salophen)(NH₃)2] با آرایش الکترونی کم اسپین (low spin)، طول و زوایای پیوندی محاسبه شده با نتایج تجربی بدست آمده از پراش اشعه ایکس کمپلکسهای مشابه مطابقت دارد (Khandar, ز 2007). بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) و پایین ترین اوربیتال ملکولی اشغال نشده (LUMO) کمپلکس در شکل ۱ نشان داده شده است.



شكل ۱. HOMO (راست) و LUMO (چپ) محاسبه شده برای كمپلكس ⁺[Co^{III}(Salophen)(NH3)2].

انتقال های الکترونی و طیف محاسبه شده برای کمپلکس ⁺[Co^{III}(Salophen)(NH₃)2] در شکل ۲ نشان داده شده است. در ناحیه کم انرژی طیف، خط جذبی محاسبه شده در طول موج ۴۷۹/۳۱ نانومتر، عمدتا مربوط به انتقالهای الکترونی LUMO-HOMO (۵۶/) و L+3-HOMO (۵۶/) میباشد.



شکل ۲. طیف الکترونی محاسبه شده بروش TDDFT برای کمپلکس +[Co^{III}(Salophen)(NH3)2] در حالت گازی.

۴– نتیجه گیری

کار پژوهشی حاضر، ساختار و طیف الکترونی کمپلکس ⁺[Co^{III}(Salophen)(NH₃)2] را با روش DFT مطالعه مینماید. اوربیتالهای HOMO و LUMO محاسبه شده، بترتیب اوربیتال مولکولی π لیگند سالوفن و اوربیتال مولکولی ضد پیوندی HOMO (π_{Salophen}—d_{Co}) ←π_{Salophen}) در کم انرژیترین خط محدهای در کم انرژیترین خط طیفی محاسبه شده در طیف کمپلکس دارد.


منابع و مراجع

[1] Asraf, Md. A., Ezugwu, C. I., Zakaria, C. M., Verpoort F. (**2019**). Homogeneous photochemical water oxidation with metal salophen complexes in neutral media. Photochem. Photobiol. Sci., 18, 2782-2791.

[2] Baniyaghoob, S. and Boghaei, D. M. (**2009**). Spectroscopic and thermodynamic studies of interaction between dopamine and cobalt(III) Schiff-Base Complexes. Scientica Iranica Transactions C: Chemistry and Chemical Engineering, 16(2), 89-93.

[3] Khandar, A.A., Shaabani, B., Belaj, F., Bakhtiari, A. (2007). Synthesis, characterization, electrochemical and spectroscopic investigation of cobalt(III) Schiff base complexes with axial amine ligands: The layered crystal structure of $[Co^{III}(salophen)(4-picoline)_2]ClO_4 \cdot CH_2Cl_2$. Inorg. Chim. Acta, 360(10), 3255-3264.



کاربرد نانو ذرات مغناطیسی آهن (IONPs) در بیوتکنولوژی و بررسی سینتیک برهمکنش با بیومولکولها و انواع روش های ساخت

هانیه برقی جهرمی'، مهدی شهرکی^۲

۱ - دانشجوی کارشناسی ارشد، شیمی تجزیه، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شیراز، (h1380.barghi@gmail.com) ۲ و ۱- نویسنده مسئول – استاد ، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، (mehdishahraki@chem.usb.ac.ir)

واژگان كليدى: نانوذرات مغناطيسى، بيوتكنولوژى، سينتيك، بيومولكول

۱– مقدمه

کاربردهای زیست پزشکی با تأکید بر طراحی مواد هوشمند، بهویژه نانوذرات مغناطیسی (MNPs) دارای مزایای فناوری هستند زیرا میتوان آنها را با استفاده از میدانهای مغناطیسی دستکاری کرد. نانوذرات مغناطیسی به طور گسترده در هیپرترمی، سیستم دارورسانی هدف، تصویربرداری، و استخراج مولکولهای زیستی مورد استفاده قرار گرفتهاند و آنها را به عنوان یک ابزار مهم در درمان سرطان نیز فرض میکنند.

در میان انواع مختلف نانوذرات، نانوذرات اکسید آهن به طور گسترده توسط محققان مورد کاوش قرار گرفتهاند، در واقع، نانوذرات اکسید آهن (Fe₃O₄) و (Fe₂O₃) به دلیل عملکرد آسان آنها با پلیمرها و مواد دیگر، به طور گسترده برای تشخیص آزمایشگاهی و حتی در حال حاضر برای سایر کاربردها استفاده شده است. روشهای مختلفی برای ساخت نانوساختارهای مغناطیسی به شکل نانومیلهها، نانوسیمها، نانومکعبها، از جمله نانوذرات مغناطیسی اکسید آهن موجود است که میتوانند با چندین روش آمادهسازی مختلف، از جمله شیمی مرطوب یا مسیرهای «پایین به بالا» مانند هیدروترمال، حلال گرمایی، سل تهیه شوند. ژل، همرسوب، سنتز تزریق جریان، تکنیکهای تجزیه در اثر حرارت الکتروشیمیایی و لیزری [۱]. به طور مشابه، بیوسنتز نانوذرات مغناطیسی مورد بررسی قرار گرفته است [۲، ۳]. بررسی های مفصلی در مورد سنتز نانوذرات مغناطیسی قبلاً گزارش شده است. با کنترل کارآمد بر اندازه ذرات، روشهای شیمی مرطوب هیدرولیتیک و غیرهیدرولیتیک نتایج

۲– بررسی نانو ساختار های اهن

نانوذرات مغناطیسی اکسید آهن (IONPs) با ساختاری مشابه شکل (۱) عمدتاً در دو دهه اخیر مورد توجه قرار گرفتهاند، زیرا مواد جاذب ارزان قیمتی هستند [۴] که امکان برداشت سیستمهای سلولی کامل [۵]و حفظ مولکولهای مختلف بیولوژیکی، از جمله پروتئینها ، اسیدهای نوکلئیک ، لیپیدها و پلی ساکاریدها را فراهم میکنند. مهمترین مزایای IONPها عبارتند از (۱) رفتار سوپرپارامغناطیس آنها است که امکان جابجایی و دستکاری آسان با استفاده از یک میدان مغناطیسی خارجی، (۲) سنتز کم هزینه آنها (عمدتا نمکهای آهن در محیط قلیایی و مواد شیمیایی برای اصلاح سطح) است. و (۳) نسبت سطح به حجم بالا . برای تنظیم ویژگیهای سطح، IONPها پوشش داده میشوند یا عملکردی میشوند تا از تجمع یا تخریب زیستی جلوگیری کنند و انتخابپذیری آنها برای جذب مولکولهای هدف را افزایش دهند[۶].

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳



سینتیک برهمکنش نانوذرات مغناطیسی آهن با زیستمولکولها ، یکی از حوزههای جذاب و پر کاربرد در نانوبیوتکنولوژی است. این برهمکنشها نقش تعیینکنندهای در خواص فیزیکوشیمیایی نانوذرات و همچنین در کاربردهای زیستی آنها دارند. زیستمولکولهایی مانند لیپیدها، پلیساکاریدها و اسیدهای نوکلئیک به دلیل خواص منحصر به فردشان، به عنوان پوشش یا ليگاند براي نانوذرات مغناطيسي مورد استفاده قرار مي گيرند[٨]. سينتيک اين برهمکنشها به عواملي همچون اندازه نانوذرات، نوع و غلظت زیستمولکول، pH محیط، دما و نیروی یونی بستگی دارد. مطالعات نشان دادهاند که برهمکنش نانوذرات با لیپیدها مىتواند منجر به تشكيل پوشش هاى ليپيدى پايدار بر روى سطح نانوذرات شود كه از اكسيداسيون آن ها جلوگيرى كرده و زیستسازگاری آنها را افزایش میدهد. پلیساکاریدها نیز به دلیل خواص هیدروفیلی و زیست تخریب پذیری خود، به عنوان پوششي براي نانوذرات مورد استفاده قرار مي گيرند و مي توانند به بهبود پايداري كلوئيدي و كاهش سميت نانوذرات كمك كنند. اسیدهای نوکلئیک نیز میتوانند به سطح نانوذرات متصل شده و برای کاربردهایی مانند تشخیص و درمان بیماریها مورد استفاده قرار گیرند. سینتیک این برهمکنشها به ساختار ثانویه و اولیه اسید نوکلئیک، دمای محیط و نیروی یونی بستگی دارد.درک عمیق سینتیک برهمکنش نانوذرات مغناطیسی با زیستمولکولها برای طراحی و ساخت نانوذرات با خواص دلخواه و کاربردهای متنوع در زمینههای مختلفی همچون دارورسانی هدفمند، تشخیص بیماریها، تصفیه آب و جداسازی زیستی ضروری است. با این وجود، مطالعات کمی بر روی سه دسته اصلی دیگر از مولکولهای زیستی یا بر روی مولکولهای کوچک تمرکز می کنند که برای صنعت بیوتکنولوژی نیز بسیار مرتبط هستند.از این رو، به دلیل تعداد کم مطالعات منتشر شده، مکانیسم جذب برای سایر مولکول های زیستی هنوز به طور سیستماتیک و به اندازه کافی بررسی نشده است. علاوه بر این، برای طراحی مواد جداسازی بهتر و افزایش کارایی پردازش پایین دست، به درک عمیقی از جذب کلاسهای بیومولکولی مختلف در مخلوطها، جایی که آنها باید برای سطح نانوذرات رقابت کنند، ضروری است[۹].

۳- نتیجه گیری

نانوذرات مغناطیسی آهن به دلیل خواص منحصر به فردی مانند اندازه کوچک، سطح ویژه بالا، خاصیت مغناطیسی و قابلیت اصلاح سطح، پتانسیل بالایی را در حوزه بیوتکنولوژی از خود نشان دادهاند. این نانوذرات در فرایندهای مختلفی از جمله جداسازی، خالصسازی، تصویربرداری و انتقال دارو مورد استفاده قرار می گیرند. نتایج حاصل از بررسی سینتیک برهمکنش نانوذرات مغناطیسی آهن با بیومولکولها نشان میدهد که عوامل مختلفی مانند اندازه نانوذرات، نوع پوشش سطحی، pH محیط و غلظت بیومولکولها بر سرعت و میزان این برهمکنش تأثیر گذار هستند.

منابع و مراجع

[1] Monteserín, M., Larumbe, S., Martínez, A. V., Burgui, S., & Francisco Martín, L. (2021). Recent advances in the development of magnetic nanoparticles for biomedical applications. Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 21(5), 2705-2741.

[2] Parekh, K., Nair, J., & Bhardwaj, A. (2020). Biosynthesis of magnetite nanoparticles: an eco-friendly and scalable approach. Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology, 11(3), 035014.

[3] Bahadur, A., Saeed, A., Shoaib, M., Iqbal, S., Bashir, M. I., Waqas, M., ... & Abbas, N. (2017). Eco-friendly synthesis of magnetite (Fe3O4) nanoparticles with tunable size: dielectric, magnetic, thermal and optical studies. Materials Chemistry and Physics, 198, 229-235.

[4] Schwaminger, S. P., Blank-Shim, S. A., Scheifele, I., Pipich, V., Fraga-García, P., & Berensmeier, S. (2019). Design of interactions between nanomaterials and proteins: a highly affine peptide tag to bare iron oxide nanoparticles for magnetic protein separation. Biotechnology journal, 14(3), 1800055.

[5] Lim, J. K., Chieh, D. C. J., Jalak, S. A., Toh, P. Y., Yasin, N. H. M., Ng, B. W., & Ahmad, A. L. (2012). Rapid magnetophoretic separation of microalgae. Small, 8(11), 1683-1692.

[6]_Gupta, A. K., & Gupta, M. (2005). Synthesis and surface engineering of iron oxide nanoparticles for biomedical applications. biomaterials, 26(18), 3995-4021.

[7] Nurdin, I., Johan, M. R., Yaacob, I. I., & Ang, B. C. (2014). Effect of nitric acid concentrations on synthesis and stability of maghemite nanoparticles suspension. The Scientific World Journal, 2014(1), 589479.

[8] Yun G, Richardson JJ, Capelli M, Hu Y, Besford QA, Weiss ACG, et al. The biomolecular corona in 2D and reverse: patterning metal–phenolic networks on proteins, lipids, nucleic acids, polysaccharides, and fingerprints. Adv Funct Mater. 2020;30:1905805.

[9] Pušnik, K., Peterlin, M., Cigić, I. K., Marolt, G., Kogej, K., Mertelj, A., ... & Makovec, D. (2016). Adsorption of amino acids, aspartic acid, and lysine onto iron-oxide nanoparticles. The Journal of Physical Chemistry C, 120(26), 14372-14381.



بررسی حلالیت داروی آلپرازولام در حلال یوتکتیک عمیق طبیعی کولین کلراید/اوره در مقایسه با آب

سمانه برومند' دلارا محمدآقایی'، فاطمه محمدپور'

۱-دانشجوی دکترا، شیمی فیزیک،دانشکده شیمی ، دانشگاه صنعتی شیراز (s.boroomand@sutech.ac.ir) ۲-نویسنده مسئول: دانشیار، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک،دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز ((d_aghaie@sutech.ac.ir) ۲-استادیار،گروه آموزش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان ،تهران (f.mohammadpour@cfu.ac.ir)

واژگان کلیدی: حلالیت دارو، شبیه سازی دینامیک مولکولی، حلال های یوتکتیک عمیق

۱– مقدمه

بنزودیازپینها از جمله آلپرازولام ، دیازپام و لورازپام حلالیت محدودی در آب خالص نشان میدهند بنابراین اغلب برای حل شدن مؤثر به عوامل حلکننده نیاز دارند[۱]. آلپرازولام با افزایش عملکرد گیرنده گاما آمینو بوتیریک اسید برروی غشای سلول های عصبی تاثیر گذاشته و سبب کاهش اضطراب و افسردگی می گردد [۲]. این دارو با وجود کاربردهای فراوان در درمان طیف وسیعی از بیماری های عصبی، در طبقه بندی سیستم بیو داروسازی، در دسته دوم که دارای حلالیت کم و نفوذ پذیری بالا می باشند قرار گرفته است[۳]. تغییر حلال یکی از مهم ترین روشها برای افزایش حلالیت داروهای کم محلول در آب می باشد و انتخاب حلال مناسب در این روش، بسیار حائز اهمیت است [۴]. استفاده از حلالهای یوتکتیک عمیق طبیعی، به ویژه ها، (Natural deep eutectic solvent) به عنوان رویکردی نوین برای افزایش حلالیت و بهبود خواص دارویی آلپرازولام و سایر داروهای کم محلول، مورد توجه قرار گرفته است .در این مطالعه تاثیر حلال یوتکتیک عمیق طبیعی کولین کلراید اوره بر روی حلالیت داروی کم محلول آلپرازولام از گروه بنزودیازپین ها بررسی گردیده ونتایج

۲ –روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

در این پژوهش با استفاده از نرم افزار گرومکس۰۵، شبیه سازی دینامیک مولکولی داروی آلپرازولام در آب و در حلال یوتکتیک عمیق انجام شد [۲]. از فورس فیلد (OPLS) برای بررسی برهم کنش های درون مولکولی و بین مولکولی برای دارو و اجزای حلال یوتکتیک عمیق طبیعی کولین کلراید/اوره با نسبت مولی (۱:۲) استفاده شد. برای ساخت حلال یوتکتیک عمیق، در ابتدا مخلوطی از کولین کلراید (۱۰۰۰ جفت یونی) به عنوان دهنده پیوند هیدروژنی و ۲۰۰۰عدد اوره (۲۰۰۰ مولکول) به عنوان گیرنده های پیوند هیدروژنی در جعبه شبیه سازی قرار داده شد. بعد از مینیمم سازی انرژی، و قراردادن در انسامبل های NVT و NVT و MD تا جایی ادامه یافت که چگالی حلالهای یوتکتیک عمیق به مقادیر تجربی آن نزدیک شود [۳]. سپس ۱۲ عدد دارو به حلال یوتکیک عمیق طبیعی و همچنین آب اضافه شده و به مدت ۵۰ نانوثانیه شبیه سازی ادامه داده شد. ۳-آنالیز تابع توزیع شعاعی (RDF) دارو...دارو و تعداد پیوندهای هیدروژنی بین دارو با حلال آب و حلال کولین کلراید/ اوره:

14.5.111.7.979

شکل AA نشان میدهد که آلپرازولام پیوندهای هیدروژنی بیشتری با مولکولهای آب، در مقایسه با کولین کلراید/ اوره تشکیل میدهد. کاهش تعداد پیوندهای هیدروژنی را میتوان به افزایش حلالیت دارو در این حلال مرتبط دانست. مطالعات نشان دادهاند که حلال های یوتکتیک عمیق میتوانند با تضعیف برهم کنشهای پیوند هیدروژنی بین مولکول های دارو با یکدیگر و همچنین با هر جز حلال یوتکتیک عمیق، سبب افزایش حلالیت دارو شوند[۴]. شکل AB، تابع توزیع شعاعی داروهای آلپرازولام را نسبت به یکدیگر در دو حلال فوق نشان میدهد. همانطور که در این شکل مشاهده میشود، مولکول های آلپرازولام در حلال آب تجمع بیشتری دارند. به طورکلی، افزایش تجمع داروها در یک حلال میتواند منجر به کاهش حلالیت به دلیل اثرات اشباع شود. نتایج فوق توزیع همگن دارو در حلال کولین کلراید/ اوره را نشان میدهد. نتایج فوق نشان میدهند که تجمع دارو در حلال کولینکلراید/ اوره نسبت به حلال کاهش یافته که منجر به بهبود قابلیت زیستی این دارو می شود [۵].



شکل ۱. (A) تعداد پیوندهای هیدروژنی بین دارو و حلال های آب وکولین کلراید/ اوره، (B) توابع توزیع شعاعی آلپرازولام...آلپرازولام در دو حلال.

4- نتيجەگىرى

امروزه حلال های یوتکتیک عمیق با بهبود حلالیت دارو به عنوان یک حلال جایگزین برای داروها بهشمار میروند. اثربخشی این حلالها میتواند بر اساس ترکیب دارو و نوع حلال یوتکتیک عمیق متفاوت باشد. در نتیجه، نیاز به تحقیقات بیشتر برای بهینه سازی و انتخاب صحیح حلال برای کاربردهای درمانی احساس میشود. در این پژوهش نشاندادهشد که باتوجه به ساختار داروی آلپرازولام، حلال یوتکتیک عمیق کولین کلراید/ اوره، توانسته است سبب افزایش حلالیت این دارو، نسبت به حلال آب شود.

منابع و مراجع

Sekharan, T.R., Chandira, R.M., Tamilvanan, S., Rajesh, S.C. and Venkateswarlu, B.S., 2022. Deep eutectic solvents as an alternate to other harmful solvents. Biointerface Res. Appl. Chem, 12, pp.847-860.
 Van Der Spoel, D.; Lindahl, E.; Hess, B.; Groenhof, G.; Mark, A. E.; and Berendsen, H. J. GROMACS: fast, flexible, and free. J. Comput. Chem. 2005, 26 (16), 1701-1718.



[3] Mokhtarpour, M., Shekaari, H., Zafarani-Moattar, M.T. and Golgoun, S., 2020. Solubility and solvation behavior of some drugs in choline based deep eutectic solvents at different temperatures. Journal of Molecular Liquids, 297, p.111799.

[4] Albertini, B., Bertoni, S., Sangiorgi, S., Nucci, G., Passerini, N. and Mezzina, E., 2023. NaDES as a green technological approach for the solubility improvement of BCS class II APIs: An insight into the molecular interactions. International Journal of Pharmaceutics, 634, p.122696.

[5]_Savjani, K.T., Gajjar, A.K. and Savjani, J.K., 2012. Drug solubility: importance and enhancement techniques. International Scholarly Research Notices, 2012(1), p.195727.

بررسی ساختار و روش تهیه متفاوت گرافن اکساید

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

امیر بلوچ'، محمد حسن پیروی'

۱ - نویسنده مسئول: دانشجوی کارشناسی ارشد ، کاتالیست، شیمی فیزیک، دانشکده علوم شیمی و نفت دانشگاه شهید بهشتی تهران Amirbalooch1377@gmail.com ۲-استاد تمام ، شیمی فیزیک،دانشکده علوم شیمی و نفت دانشگاه شهید بهشتی تهران <u>M-Peyrovi@sbu.ac.ir</u>

واژگان کلیدی: روش هامرز، لایه برداری گرافیت، گرافیت پولکی

۱– مقدمه

در سال های اخیر، گرافن اکساید در صنایع مختلف با خواص مختلفی مانند مساحت سطح بالا، استحکام مکانیکی بالا و عملکرد عالی در فرآیند کاتالیزوری توسعه یافته است. گرافن اکساید با اکسیداسیون و لایه برداری گرافیت پولکی تهیه می شود زیرا عامل مهمی برای تعیین ساختار گرافن اکساید می باشد[1]. این مطالعه بر روی سنتز گرافن اکساید و مسائلی در فرآیند تهیه آن متمرکز شده است. در این مقاله، روش سنتی هامر را به همراه تغییراتی که در آن دادیم بررسی و نتیجه ی آن را مشاهده میکنیم.

۲- روش

برای تهیه گرافن اکساید ابتدا گرافیت پولکی را با استفاده از هیدروژن پراکساید و اسید سولفوریک غلیظ به نسبت ۱ به ۹ لایه برداری می کنیم. سپس نمونه را برای چند ساعت رها می کنیم تا عملیات لایه برداری به خوبی صورت بگیرد. سپس نمونه را در دمای صفر تا پنج درجه سانتی گراد قرار می دهیم. بعد از حدود دو ساعت، ۶ برابر مقدار گرافیت ریخته شده، پتاسیم پرمنگنات به محلول اضافه می کنیم تا عملیات اکسیداسیون انجام شود. در این حین محلول با سرعت پایین همزده می شود و بعد از اضافه کردن کامل پتاسیم پرمنگنات رنگ محلول به سبزتیره تغییر می کند. محلول با سرعت چهار ساعت در دمای ۲۰ درجه سانتی گراد همزده می شود. ۵۰۰ میلی لیتر آب مقطر سرد را درون بشر ریخته و آهسته آهسته و با احتیاط به محلول اضافه می کنیم و از تماس با بخارات آن جلوگیری می کنیم. بعد از اضافه کردن کامل آب مقطر، محلول سه درصد وزنی از اضافه می کنیم و از تماس با بخارات آن جلوگیری می کنیم. بعد از اضافه کردن کامل آب مقطر، محلول سه درصد وزنی از میدروژن پراکساید را آماده می کنیم و قطره قطره به محلول اضافه می کنیم تا پتاسیم پرمنگنات اضافی از محلول خارج شود[2]. می شود. مایع روی آن را دور ریخته و سپس نمونه سه بار با هیدروکلریک اسید رقیق و پنج بار با آب مقطر با قیف بوخنر شسته می شود. مایع روی آن را دور ریخته و سپس نمونه سه بار با هیدروکلریک اسید رقیق و پنج بار با آب مقطر با قیف بوخنر شسته می شود. نمونه را روی شیشه ساعت و در شرایط محیط به مدت سه روز رها می کنیم تا خرای آن مقطر با قیف بوخنر شسته





شکل ۲: پیک مربوط به گرافن اکساید را در ۱۱.۱۴ درجه نشان می دهد.

در آنالیز سنجش مادون قرمز تبدیل فوریه (FTIR) نمونه پیک های ضعیفی را در ۱۹۱۴ و ۱۷۲۶ سانتی متر به توان منفی یک نشان می دهد که می تواند به ارتعاشات کششی C=O و C=O کربوکسیلیک اسید و گروه های کربونیل در لبه های نمونه نسبت داده شود. جذب درناحیه ۱۳۸۴ و ۱۱۷۶ سانتیمتربه توان منفی یک به ترتیب با ارتعاشات کششی C-O و کربوکسیلیک اسید و گروه های کربونیل در لبه مای نمونه کربوکسیلیک اسید و گروه های کربونیل در ایم های نمونه بیک مارد می دواند به ارتعاشات کششی C-O و کربوکسیلیک اسید و گروه های کربونیل در ایم های نمونه کربوکسیلیک اسید و گروه های کربونیل در ایم های نمونه کربوکسیلیک اسید و گروه های کربونیل در ایم های نمونه کربوکسیلیک اسید و گروه مارتیب با ارتعاشات کششی C-O باشرد مارد که نشان دهنده وجود گرافن اکساید می باشد[4].(شکل ۲)



شکل ۳: گروه های عاملی مربوط به گرافن اکساید را نشان می دهد.

در نتیجه، با افزودن هیدروژن پراکساید به اسید سولفوریک غلیظ و با استفاده از نتایج حاصل از آن می توانیم گرافن اکساید را با راحت ترین روش و کیفیت مطلوب تهیه کنیم.



منابع و مراجع

[1] Zhang, C., Lv, W., Xie, X., Tang, D., Liu, C., & Yang, Q. H. (2013). Towards low temperature thermal exfoliation of graphite oxide for graphene production. *Carbon*, *62*, 11-24.

[2] Benzait, Z., & Trabzon, L. (2022). Graphite size effect on chemical expansion and graphene oxide properties. ACS omega, 7(42), 37885-37895.

[3] Shao, G., Lu, Y., Wu, F., Yang, C., Zeng, F., & Wu, Q. (2012). Graphene oxide: the mechanisms of oxidation and exfoliation. *Journal of materials science*, *47*, 4400-4409.

[4] Dimiev, A., Kosynkin, D. V., Alemany, L. B., Chaguine, P., & Tour, J. M. (2012). Pristine graphite oxide. *Journal of the American Chemical Society*, 134(5), 2815-2822.



بررسی قدرت مهار پروتئاز اصلی توسط برخی از مشتقات ابسلن: یک مطالعهی داکینگ مولکولی

هانیه بلوچ' ، علی ابراهیمی'، نجمه مصطفوی'

HaniyehBaluch@gmail.com ا مایستان و بلوچستان، ebrahimi@chem.usb.ac.ir ۲- استاد ، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، ebrahimi@chem.usb.ac.ir ۳- دکتری ، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، mostafavi.najmeh@gmail.com

واژگان كليدى: پروتئاز اصلى، كوويد ١٩، ابسلن، داكينگ مولكولى

۱– مقدمه

همه گیری بی سابقه بیماری کروناویروس ۲۰۱۹ (کووید ۱۹) منجر به بیش از ۵.۵ میلیون مورد تایید شده و بیش از ۳۵۰۰۰ مرگ و میر در بیش از ۲۰۰ کشور، منطقه و مرز تا ۲۸ می ۲۰۲۰ شده است [1]. بدون درمانهای هدفمند موجود، گزینههای درمانی برای بیماران کووید ۱۹ محدود باقی می ماند [2]. پروتئاز اصلی کروناویروس یک آنزیم سیستئین است که برای تکثیر و رونویسی ویروس حیاتی است، بنابراین هدف بالقوهای برای درمان ضد ویروسی را نشان می دهد. ابسلن، یک داروی چند منظور، منظور، مناوی می ماند [2]. پروتئاز اصلی کروناویروس یک آنزیم سیستئین است که برای تکثیر و رونویسی ویروس حیاتی است، بنابراین هدف بالقوهای برای درمان ضد ویروسی را نشان می دهد. ابسلن، یک داروی چند منظوره به عنوان یک مهار کننده پروتئاز اصلی شناسایی شده است. با استفاده از شیمی دارویی و استراتژیهای منطقی طراحی دارو، ما یک دسته ساختار از مشتقات ابسلن را در نظر می گیریم که SARS-CoV-2 پروتئاز اصلی را هدف قرار می دهند. به طور کلی، شناسایی مشتقات ابسلن با فعالیت ضد ویروسی بهبود یافته ممکن است به پتانسیل رشدی برای درمان تکثیر کووید ۱۹ مناسایی مشتقات ابسلن با فعالیت ضد ویروسی بهبود یافته ممکن است به پتانسیل رشدی برای درمان تکثیر کووید ۱۹ و شناسایی مشتقات ابسلن با فعالیت ضد ویروسی بهبود یافته ممکن است به پتانسیل رشدی برای درمان تکثیر کووید ۱۹ و زیار میدم در از در می در دری است به پتانسیل رشدی برای درمان تکثیر کووید ۱۹ و شناسایی مشتقات ابسلن با فعالیت ضد ویروسی بهبود یافته ممکن است به پتانسیل رشدی برای درمان تکثیر کووید ۱۹ و شناسایی منتول و ایل میرویس در می در می در می در می در مان در می در می در می در می در می در ایل به عنوان بازدارنده برای تعدیل فعالیت 2-۲۰۵



شکل ۱– ساختار کلی مشتقات ابسلن

۲- روش

PDB ID) N3 ساختار کریستالی مبتنی بر پراش اشعه ایکس SARS-CoV-2 پروتئاز اصلی در کمپلکس با یک مهارکننده N3 (PDB ID) از پایگاه داده PDB RCSB بازیابی شد [4]. آماده سازی پروتئین توسط نرم افزار SYBYL-X 2.0 شامل اصلاح اسکلت اصلاح زنجیرههای جانبی، اضافه کردن اتمهای هیدروژن ، حذف آب و بهینهسازی اسیدهای آمینه انجام شد. سپس کتابخانهای شامل ۱۲۰۰ ترکیب از مشتقات ابسلن به عنوان لیگاند با جایگزینی استخلافهای متنوع در دو قسمت معین R و Ar با این نرم افزار مدلسازی و بهینهسازی شد. مکان سایت فعال برای داکینگ مولکولی توسط محل اتصال لیگاند با پروتومول (نمایش محاسباتی از محل اتصال موردنظر برای اتصال لیگاندها به محل اتصال گیرنده به طور خودکار) در ساختار کریستالی پروتئین تعیین شد. محاسبات داکینگ مولکولی بر اساس الگوریتم Surflex-Dock GeomX توسط بسته نرم افزاری SYBYL-X 2.0 انجام شد. مدل داکینگ مولکولی با توابع امتیازدهی ارزیابی شد.

دانسکاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

ما در محاسبات داکینگ مولکولی، حالتهای خروجی کمپلکسهای گیرنده-لیگاند را با استفاده از توابع امتیازدهی بالا انتخاب کردیم. total score، نشاندهندهی امتیازدهی جامع است که هر چه امتیاز آن بالاتر باشد، ترکیب خروجی بهتر است. به طور کلی، نمره بالاتر از ۶ را میتوان به عنوان یک ترکیب خروجی بهتر ارزیابی کرد. ۴۲ ترکیب از این مشتقات امتیاز کل بالاتر از ۶ داشتند که بر این اساس میتوان گفت قدرت مهارکنندگی این کمپلکسهای گیرنده-لیگاند بیشتر است. ترکیب از EB1 با امتیاز کل ۲۰۱۴ کیلوکالری بر مول، با بیشترین فعالیت برهمکنش بین مولکولهای لیگاند و پروتئین گیرنده انتخاب شد که بیشترین مقدار PIC50 و قدرت مهارکنندگی را نیز دارد. در شکل ۲، نمایی از این لیگاند در جایگاه فعال در بین پنج لیگاند برتر با

شکل۲- نمایی از EB1 با بیشترین قدرت مهارکنندگی در جایگاه فعال در بین پنج لیگاند برتر با استخلافهای مختلف.

NH2

همچنین همبستگی مناسبی با R² = 0.6 بین مقادیر داکینگ مولکولی با قدرت مهارکنندگی ۳۶ ترکیب از این مجموعه که مقادیر pIC50 آنها مشخص است مشاهده گردید. موقعیتهای اتصال برای برهمکنش با باقیماندههای کلیدی نیز مانند Cys 145 ارزیابی شد که ترکیب انتخاب شده، این برهمکنش را دارا میباشد.

۳- نتیجه گیری

1) R = CH2-COOH, Ar = Ph-NH-SO2-C3H5

2) R = C(CH3)3, Ar = C5H8N-COO-C(CH3)3
3) R = C(CH3)3, Ar = C5H8N-CO-Ph-SO2-

4) R = S-CH3, Ar = C5H8N-COO-C(CH3)3

5) R = CH2-CH2-OH, Ar = Ph-NH-SO2-C3H5

بر اساس نتایج داکینگ مولکولی، کمپلکسهای گیرنده-لیگاند با بالاترین امتیاز کل انتخاب شدند که نشان میدهد مولکولهای ابسلن فعالیت اتصال خوبی با 2-SARS-CoV پروتئاز اصلی دارند.EB1، از قویترین مهارکنندههای پروتئاز اصلی در بین مشتقات ابسلن با فعالیت ضد ویروسی بهبود یافته در مقایسه با ابسلن بود.

منابع و مراجع

[1] Luan, B., Huynh, T., Cheng, X., Lan, G., & Wang, H. R. (2020). Targeting proteases for treating COVID-19. Journal of proteome research, 19(11), 4316-4326.

[2] Huff, S., Kummetha, I. R., Tiwari, S. K., Huante, M. B., Clark, A. E., Wang, S., ... & Rana, T. M. (2021). Discovery and mechanism of SARS-CoV-2 main protease inhibitors. Journal of medicinal chemistry, 65(4), 2866-2879.







[3] Qiao, Z., Wei, N., Jin, L., Zhang, H., Luo, J., Zhang, Y., & Wang, K. (2021). The Mpro structure-based modifications of ebselen derivatives for improved antiviral activity against SARS-CoV-2 virus. Bioorganic Chemistry, 117, 105455.

[4] Wang, K. Y., Liu, F., Jiang, R., Yang, X., You, T., Liu, X., ... & Yang, H. (2020). Structure of Mpro from COVID-19 virus and discovery of its inhibitors. Nature, 582(7811), 289-93.



از خطا محاسبه شد.

۳- نتايج

ساختارهای بهینه هر یک از مولکولهای کیتوزان، اوره و آب در شکل ۱ نشان داده شدهاند و انرژیهای برهمکنش کیتوزان-اوره و کیتوزان-آب در جدول ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱- از سمت راست به چپ به ترتیب: مولکول آب، مولکول اوره و مولکول دیمر کیتوزان



جدول ۱: انرژیهای برهمکنش کمپلکس کیتوزان-اوره و کیتوزان-آب

انرژی برهمکنش(Kcal/mol)	سطح تئورى	حلال	كمپلكسها	
-11/97	PBE0 DFT-D3/def2-tzvp	گاز	کیتوزان-اورہ	
-9/63	PBE0 DFT-D3/def2-tzvp	گاز	کیتوزان-آب	

۴- نتیجه گیری

در این کار، کمپلکسهای دیمرکیتوزان-اوره و دیمر کیتوزان-آب با بهینهسازی ساختارهایشان مورد ارزیابی قرار گرفتند. برهمکنش بین دیمر کیتوزان-اوره و دیمر کیتوزان-آب از نوع پیوند هیدروژنی متوسط میباشد. انرژی برهمکنش دیمر کیتوزان-اوره بیشتر از انرژی برهمکنش دیمر کیتوزان-آب میباشد. پارامتر واکنش پذیری شیمیایی اوره نشان میدهد که مولکول اوره الکتروفیل تر از مولکول آب میباشد و دیمر کیتوزان-اوره نسبت به مولکول دیمر کیتوزان-آب پیوند هیدروژنی قوی تری دارد.

منابع و مراجع

- Siahaan, P., Sasongko, N. A., Lusiana, R. A., Prasasty, V. D., & Martoprawiro, M. A. (2021). The validation of molecular interaction among dimer chitosan with urea and creatinine using density functional theory: In application for hemodyalisis membrane. *International Journal of Biological Macromolecules*, 168, 339–349..2020.12.052.
- (2) Costa, M. P. M., Prates, L. M., Baptista, L., Cruz, M. T. M., & Ferreira, I. L. M. (2018). Interaction of polyelectrolyte complex between sodium alginate and chitosan dimers with a single glyphosate molecule: A DFT and NBO study. *Carbohydrate Polymers*, 198, 51–60..2018.06.052.



بررسی ترمودینامیکی جذب سطحی مولکول اسید فولیک بر روی نانوحامل پپتیدی دی فنیل آلانین در درمان سرطان: مطالعات تئوری

مريم بهشتى مارنانى'، محسن افتاده'، نسرين سهرابى''، فاطمه سادات فاطمى نسب'، مرتضى رضايى سادات^

۱- محقق ، رشته شیمی فیزیک،گروه شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه پیام نور تهران، رایانامه (m6366530@gmail.com) ۲ استاد، رشته شیمی کوانتومی،گروه شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه پیام نور تهران، رایانامه (mooftadeh@pnu.ac.ir) ۳- دانشیار، رشته بیو شیمی فیزیک،گروه شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه پیام نور تهران، رایانامه (nsohrabi99@pnu.ac.ir) ۴- استادیار ، رشته شیمی فیزیک گروه ،شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه مازندران، رایانامه (fimfatemi61@gmail.com)

واژگان کلیدی: فولیک اسید، نانوحامل پپتیدی، شبیهسازی دینامیک مولکولی، تابع توزیع شعاعی، انرژی آزاد گیبس .

۱–مقدمه

۱–۱– پپتید دی فنیل آلانین

مولکول دیفنیلآلانین، پپتیدی دوتایی با قابلیت خودآراشدن بهصورت نانولوله/میکرولوله بسیار منظم، کریستالهای میکرومتری، نانوسیم و نانوجنگل میباشد. گاهی این واحدهای ساختاری در محیط آبی هنگام خودآرایی به صورت نانو حفره در می آیند (Liu, 2005).

۲-۱-فولیک اسید

اسید فولیک، فرم ساختگی و مصنوعی ویتامین B9 است که عمدتاً در حبوبات یافت میشود و مصرف مکمل از کمبود آن پیشگیری می کند. مصرف کافی و متعادل ویتامین B9 به کاهش سطح هموسیستئین کمک، و از بروز نقایص تولد و سرطان پیشگیری می کند (Muralidharan, 2016).

۲-روش

در این پژوهش از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است ،همهی شبیهسازیهای این بخش با نرمافزار گرومکس ۲۰۲۱، میدان نیروی Amber03 و مدل آب SPC/E انجام شده و از جعبهی مکعبی با اعمال شرایط مرزی سه بعدی استفاده شده و گونه های مختلف به طور تصادفی در داخل جعبهی شبیه سازی قرار گرفته اند. محاسبه ی انرژی آزاد اتصال حامل نانو حفره ی پپتیدی و اسید فولیک با دو روش پتانسیل نیروی متوسط (Park, 2003) طبق رابطه ی جارزینسکی (رابطه ۱) و مساحت سطحی پویسون-بولتزمن انجام شده است (2012).



 $\Delta G_{binding} = E_{Min} - E_{Max}$

۳- بحث و نتیجه گیری

(1)

انرژی آزاد گیبس اتصال اسید فولیک به حامل نانوحفرهی پپتیدی در دمای ۳۱۰ کلوین و در انسامبل NPT با روش پتانسیل نیروی متوسط (شکل۱) و روش مساحت سطحی پویسون بولتزمن(جدول۱) به ترتیب برابر ۲۰/۱۴–۸/۶۰– و ۲۰/۱۰±۰/۱۰– کیلوکالری بر مول بهدست آمده است که با توجه به این مقادیر میتوان نتیجه گرفت که فرآیند بارگذاری یا کپسولهشدن فولیک اسید در حامل از نظر ترمودینامیکی مطلوب میباشد.



شکل ۱ : نمودار تغییرات انرژی آزاد نسبت به تغییر فاصله مرکز جرم حامل و فولیک

نوع انرژی	انرژی(کیلو کالری بر مول)
ΔG_{ele}	- F •/XY
ΔG_{vdw}	-Y1/X9
ΔG_{polar}	56/24
$\Delta G_{nonpolar}$	-7/7۶
$\Delta G_{ ext{PBSA}}$	-λ/۴λ
TΔS	•/87
ΔG binding	-9/) •

جدول ۱: پارامترهای ترمودینامیکی حاصل از روش پویسون – بولتزمن

منابع و مراجع

[1] Liu, X., Theil, EC., (2005). Ferritins: dynamic management of biological iron and oxygen chemistry. *Accounts of Chemical Research*. 38(3), 167-175. https://doi.org/10.1021/ar0302336.

[Y] Muralidharan, R., Babu, A., Amreddy, N., Basalingappa, K., Mehta, M., Chen, A., Zhao, YD., Kompella, UB., Munshi, A., Ramesh, R., (2016). Folate receptor-targeted nanoparticle delivery of HuR-RNAi suppresses lung cancer cell proliferation and migration. *Journal of Nanobiotechnology*. 14(1), 1-17. https://doi.org/10.1186/s12951-016-0201-1.



[3] Park, S., Khalili-Araghi, F., Tajkhorshid, E., Schulten, K., (2003). Free energy calculation from steered molecular dynamics simulations using Jarzynski's equality. *The Journal of Chemical Physics*. 119(6):3559-3566. https://doi.org/10.1063/1.1590311.

[4] Homeyer, N., Gohlke, H., (2012). Free energy calculations by the molecular mechanics Poisson– Boltzmann surface area method. *Molecular Informatics*. 31(2), 114-122. <u>https://doi.org/10.1002/minf.201100135</u>.



مطالعه خواص حجمی محلول دوجزیی غیر الکترولیت شامل اتیلن گلیکول مونو متیل اتر و ۱- هپتانول در دماهای مختلف

فاطمه پرویز'، حسین ایلوخانی'، خاطره خانلرزاده"

۱- دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و علوم نفت ، بوعلی سینا، 2001parviz@gmail.com ۲- استاد، ترمودینامیک، شیمی فیزیک، شیمی و علوم نفت، بوعلی سینا، iloukhani.iloukhani@basu.ac.ir ۳- دکتری تخصصی، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و علوم نفت، بوعلی سینا، khaterehkhanlarzadeh@gmail.com

واژگان كليدى: اتيلن گليكول مونو متيل اتر، ١- هپتانول، چگالى، حجم مولى فزونى، معادله ردليچ – كيستر.

۱– مقدمه

در این تحقیق خواص حجمی محلول دوجزئی شامل: اتیلن گلیکول مونو متیل اتر و هپتانول مطالعه شده است. چگالی، ρ , برای مخلوط در همهی محدودهی کسر مولی در دماهای K (۲۹۸/۱۵ تا ۲۹۸/۱۵) با فواصل ۱۰ درجه کلوین اندازه گیری شدهاند. با استفاده از این مقادیر، کمیتهای ترمودینامیکی مانند حجم مولی فزونی، $V_{m,i}^{E}$ ، حجم مولی جزئی فزونی، $V_{m,i}^{E}$ ، شدهاند. با استفاده از این مقادیر، کمیتهای ترمودینامیکی مانند حجم مولی فزونی، V_{m}^{E} ، حجم مولی جزئی فزونی، آزمایشگاهی شدهاند. با استفاده از این مقادیر، کمیتهای ترمودینامیکی مانند حجم مولی فزونی، $V_{m,i}$ ، حجم مولی جزئی فزونی، آزمایشگاهی ضریب انبساط گرمایی فزونی، ع $(r, V_{m,i})$ ، برای مخلوط های دوجزئی برای مخلوط اتیلن گلیکول مونو متیل اتر + هپتانول مثبت چگالی محاسبه شدهاند. مقادیر، V_m^E ، برای مخلوطهای دوجزئی برای مخلوط اتیلن گلیکول مونو متیل اتر + هپتانول مثبت می باشد؛ با استفاده از مقادیر به دستآمده، ماهیت و قدرت برهم کنشهای بینمولکولی مورد بحث و بررسی قرار گرفته اند. می با ستفاده از مقادیر به دستآمده، ماهیت و قدرت برهم کنشهای بینمولکولی مونو متیل اتر + هپتانول مثبت می باشد؛ با استفاده از مقادیر به می از گرفته اند. حجم مولی چگالی محاسبه شده از مقادیر به دستآمده، ماهیت و قدرت برهم کنشهای بینمولکولی مورد بحث و بردسی قرار گرفته اند. دادههای چگالی و حجم مولی فزونی، یک منبع اطلاعاتی قوی برای شناخت برهم کنشهای بینمولکولی و ساختاری مولکولهای حالال و حل شونده با اندازههای مختلف و همچنین شکل و ماهیت شیمایی متفاوت هستند[3-1].

۲- روش

از آنجا که در کار تحقیقاتی خلوص مواد از اهمیت ویژه ای برخوردار است ابتدا از طریق مقایسه دانسیته و سرعت صوت اندازه گیری شده برای مواد خالص با مقادیر موجود در مراجع از خلوص مواد اطمینان حاصل گردید. سیپس چگالی مواد خالص و مخلوطها، با استفاده از دستگاه چگالی سنج Anton Paar مدل DSA 5000 در دماهای متفاوت و فشار محیط و همه گستره کسر مولی با عدم قطعیت g.cm⁻³ اندازه گیری گردید. برای ساختن کسر های مولی از ترازوی METLER با دقت ۰/۰۰۰۱ استفاده شد.

۳- بحث ونتيجه گيرى

با استفاده از مقادیر چگالی اندازه گیری شده، حجم مولی فزونی، V_m^E ، حجم مولی جزئی فزونی، $\overline{V}_{m,i}^E$ ، ضریب انبساط گرمایی فزونی، α^E ، تغییرات آنتالپی نسبت به فشار در دما و کسرمولی ثابت، محاسبه شده اند. ،همه ی مقادیر V_m^E ، مثبت هستند و با افزایش دما در تمام محدوده ی کسر مولی انحراف افزایش می یابد. حداکثر مقدار V_m^E در محدوده ی کسر مولی ۰/۵ است. مقادیر مثبت حجم مولی فزونی بیانگر این نکته است که برهم کنشها موجب تخریب ساختار میشوند، و منجر به مثبت شدن مقادیر حجم مولی فزونی میشوند شکل (۱). به عبارت دیگر مولکول های خالص هر دو دارای پیوندهای هیدروژنی هستند. پس از اختلاط به دلیل تخریب ساختار خود تجمعی انحراف مثبت نشان میدهند. پیوندهای هیدروژنی تشکیل شده بین حلال و حل شونده ضعیفتر از مولکولهای خالص آنها بوده بنابراین در محلول انحراف مثبت مشاهده میشود. . مقادیر حجم مولی فزونی،⁻Wⁿ، سیستم دوتایی با معادلهی ردلیچ – کیستر همبسته شده است[4].



شکل ۱: (a) حجم مولی فزونی، Vm^E، (d) ضریب انبساط گرمایی فزونی، α^E، (c) تغییرات آنتالپی مولی فزونی با فشار در دما و ترکیب درصد ثابت، ۲۹۸/۱۵ K(ا) حجم مولی جزئی فزونی، V^E_{m,i}، در دماهای مختلف (A×M^Em/dP)T,x (■)، ۲۹۸/۱۵ K((■)، (•)، ۳۱۸/۱۵ K ((▲) }. نقاط مربوط به مقادیر تجربی و خطوط مربوط به مقادیر محاسبه شده از معادله ردلیچ – کیستر وابسته به دما می باشد.

منابع و مراجع

[1] Khanlarzadeh., & Iloukhani, H. (2018). Thermo-acoustical and volumetric studies on interionic interactions of l-histidine in aqueous maltose solutions at different temperatures. Journal of molecular liquids. 271, 421–428. [2] Iloukhani, H., Soleimani, M., & Khanlarzadeh, K. (2017). The study of physico-chemical properties of binary systems consisting of N-Methylcyclohexylamine with 2-alkanols at T = (298.15-328.15) K. The journal of chemical thermodynamics. 110, 110-126.

[3] Sanz., L.F., Gonzalez, J.A., Gaciadela Fuene, I., & Cobos, J.C. (2015). Thermodynamics of mixtures with strongly negative deviations from Raoult's law. XII. Densities, viscosities and refractive indices at T = (293.15 to 303.15) K for (1-heptanol, or 1-decanol + cyclohexylamine) systems. Application of the ERAS model to (1-alkanol + cyclohexylamine) mixture. The journal of chemical thermodynamics. 80, 161-171.

[4] Redlich, O., & Kister, A.T. (1948). Algebraic representation of thermodynamic properties and . Journal of industrial and engineering chemistry, 40, 345–348.

جذب کروم (VI) با استفاده از جاذب چارچوب فلز-آلی مبتنی بر زیرکونیوم

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳

فرشادمیرزایی ولدی^۱ ، محمد پسندیده ندامانی^{۲ ،*}

۱ - دکتری، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی و دانشگاه صنعتی شریف، (mirzaeefarshad204@gmail.com) ۲ و *-ارشد، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی و دانشگاه مازندران، (m.pasandideh21@gmail.com)

واژگان کلیدی: چارچوب فلز-آلی، جذب، کروم (VI) ،

۱– مقدمه

برخلاف حذف آلایندههای آلی از محلولهای آبی، فلزات سنگین به راحتی تجزیه نمیشوند و به عنوان یک تهدید دائمی برای محیط زیست باقی میمانند [۱]. کروم (VI)، به عنوان یکی از فلزات سنگین یکی از آلایندههای خطرناک آب است که توسط سازمان بهداشت جهانی (WHO) [۲]. در سالهای اخیر، تکنیکهای متعددی برای حذف کروم (VI) از محلولهای آبی توسعه یافتهاند. در میان تکنیکهای مختلف توسعهیافته برای حذف کروم (VI)، جذب به دلیل کارایی بالا، سادگی، مصرف انرژی کم و قابلیت بازیافت آسان، توجه بیشتری را به خود جلب کرده است [۲]. چارچوب فلزی- آلی (MOF) به دلیل ساختارهای کریستالی منحصر به فرد و خواص عالی آن مورد توجه گسترده ای قرار گرفته است. MOF یک پلیمر هماهنگی ویژه است که از واکنش خوشه های فلزی با لیگاندهای آلی تشکیل می شود. در مقایسه با سایر مواد، MOF دارای مزایای زیادی است، از بمله ساختارهای فضایی بسیار کریستالی، سطح ویژه عظیم و قابلیت اصلاح عالی [۱]. در مطالعه حاضر، ما مواد MOF

۲- روش





شکل ۱: تصویر شماتیک سنتز MOF-808



۳- بحث



شكل a):(a):(a) الكوهاي XRD، (b) طيف FE-SEM) تصاوير FE-SEM از MOF-808 خالص

شکل ۳ مکانیسم جذب کروم (VI) بر روی جاذب MOF-808 را در محیطی اسیدی به خوبی نشان می دهد.



شکل ۲: مکانیسم جذب MOF -801 برای کروم (VI) در آب.



۴- نتیجهگیری

حداکثر ظرفیت جذب MOF-808 در دمای محیط و ۳۴۸ mg/g برای کروم (VI) بود و تعادل جذب بعد از ۳۰ دقیقه به دست آمده است. مدلهای سینتیکی مرتبه دوم و ایزوترم لانگمویر برای توصیف فرآیند جذب کروم (VI) در مناسب تر هستند، که نشان میدهد این فرآیند یک جذب تکلایه از نظر فیزیکی کنترل شده است. به طور کلی، MOF-808 خواص جذب را به خوبی نشان داده است، و یافته های ما ممکن است ایده جدیدی برای توسعه جاذب کارآمد برای حذف کروم (VI) از فاضلاب ارائه دهد.

منابع و مراجع

[1] Qiu, B. Hu, Z. Chen, H. Yang, L. Zhuang, X. Wang, (2021) Challenges of organic pollutant photocatalysis by biochar-based catalysts, Biochar.

[2] J. WooáLee, S. BináKim, (2010) Enhanced Cr (VI) removal using iron nanoparticle decorated graphene, Nanoscale, 3 (2011)3583-3585.



مطالعه الکتروشیمیایی ماده دارویی پاراستامول برروی الکترود های اصلاح شده با ساختار گرافنی

سعیدہ پورھادی نجف آبادی'*، رضا صفری ؓ و علی احسانی ؓ

ا و «- نویسنده مسئول :کارشناسی ارشد، شیمی گرایش شیمی فیزیک ، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه دانشگاه قم porhadi1997@gmail.com ۲- دکتری، شیمی گرایش شیمی فیزیک ،گروه شیمی، دانشکده علوم پایه دانشگاه قم R.Safari@qom.ac.ir ۳- دکتری، شیمی گرایش شیمی فیزیک ،گروه شیمی، دانشکده علوم پایه دانشگاه قم A.Ehsani@qom.ac.ir

واژگان کلیدی: الکتروشیمی، شیمی فیزیک دارویی، پار استامول

۱– مقدمه

امروزه استفاده از ترکیبات نانو در دانش پزشکی و دانش دارورساندی هدفمند حال رشد است. از این رو، مطالعه نظری و تجربی ساختارهای دارویی از اهمیت خاصی برخوردار هستند.با توجه به اهمیت و میزان مصرف زیاد ماده دارویی پاراستامول، در این پژوهش به مطالعه برخی از خواص الکتروشیمیایی این دارو پرداخته شد. پاراستامول با فرمول شیمیایی 28H9NO2 در این پژوهش به مطالعه برخی از خواص الکتروشیمیایی این دارو پرداخته شد. پاراستامول با فرمول شیمیایی 28H9NO2 در این پژوهش به مطالعه برخی از خواص الکتروشیمیایی این دارو پرداخته شد. پاراستامول با فرمول شیمیایی 28H9NO2 در این پژوهش به مطالعه برخی از خواص الکتروشیمیایی این دارو پرداخته شد. پاراستامول با فرمول شیمیایی 28H9NO2 در این داروی ضد درد و ضد تب است که به عنوان مسکن درد نیز مورداستفاده گسترده قرار می گیرد . [۲–۱] هدف از انجام این پژوهش، مطالعه رفتار الکتروشیمیایی ماده دارویی پاراستامول برروی الکترود های اصلاح شده با ساختار گرافنی است. در این راستا، از آزمونهای مختلف الکتروشیمیایی (ماند روشهای ولتامتری و امپدانس) استفاده شد. انتظار می رود اینگونه پژوهشها برون این و این و این دروسیایی ولتامتری و ایندی و این و این و این و ایند روشهای ولتامتری و این این و ای

۲- روش

به منظور بررسی رفتار الکتروشیمیایی ماده دارویی پاراستامول از آزمون ولتامتر چرخه ای (در غیاب و حضور لکترودهای گرافیتی حاوی گرافن، حامل دارو) استفاده شد. در این راستا، از نیکل (در محیط قلیایی سدیم هیدروکسید ۰.۱ مولار) نیز به منظور افزایش فعالیت کاتالیستی سامانه استفاده شد. برخی از نتایج به دست آمده در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: ولتاموگرام های چرخهای در سرعت روبش پتانسیل ^{۱۰} mVS ۱۰ مربوط به سامانهG/Niدر غیاب پاراستامول (۱) و برای سامانه G/Ni (۲) و برای سامانه G/Graphene-Ni (۳)، در حضور پاراستامول 2mM و در حضور محلول سدیم هیدروکسید ۰/۱M

همانطور که از شکل ۱ برمی آید، جریان اکسیدی بر روی الکترود گرافیتی در سامانه G/Graphene-Ni در حضور پاراستامول بسیار بیشتر از این جریان در غیاب پاراستامول است که این نشان دهنده تاثیر پاراستامول و اکسید شدن آن بر سطح الکترود می-باشد. به علاوه، در این پژوهش با استفاده از روش کرنوآمپرومتری ضریب نفوذ پاراستامول در حضور الکترود اصلاح شده با گرافن برابر 4.61×10-6 1-20s1 به دست آمده است. برخی از این نتایجبه دست آمده در شکل های ۳ و ۲ نشان داده شده است.



شکل2: (الف) نمودار کرنو آمپرو گرامهای دو مرحلهای (پتانسیلهای مرحلهای به تر تیب ۳۷ س ۲۷۰ و ۳۲۰) برای سامانه الکترودی Graphene-Ni/ و در حضور محلول سدیم هیدروکسید ۱۸/۰ برای غلظتهای مختلف پاراستامول: (۸) ۵ ش ۸ (۸) ۴، (۲) ، ۳ (۶) ، ۲ (۵) : ۱/۶، (۲) : ۱/۲، (۳) ، ۱/۱)).



۳- بحث و نتیجه گیری

در این پژوهش، اکسیداسیون الکتروکاتالیستی پاراستامول بر روی یک الکترود گرافیت اصلاحشده با گرافن عامل دار بررسی شد. به علاوه، مطالعه سازوکار اکسایش سامانه دارو-گرافن و همچنین مطالعه سینتیک واکنشهای محتمل و محاسبه ضرایب نفوذ دارو با استفاده از آزمونهای ولتامتری چرخهای و کرونوآمپرومتری انجام گرفت. نتایج به دست آمده از آزمونهای مختلف الکتروشیمی نشان داد که در حضورماده دارویی پاراستامول جریان اکسیدی بر روی الکترود گرافیتی و G/Graphene-INI بسیار بیشتر از جریان در غیاب پاراستامول است که این نشان دهنده تاثیر ماده دارویی پاراستامول و اکسید شدن آن بر سطح الکترود می آباشد. تحلیل نتایج نشان داد که بخشی از جریان مشاهده شده به علت اکسیداسیون پاراستامول توسط NiOOH بسیار و بخشی دیگر از آن مربوط به اکسیداسیون پاراستامول بر روی سطح اکسید و یا میان لایه اکسیدی می باشد. انتظار می رود روش ارایه شده در این پژوهش بتواند به عنوان روشی مناسب جهت اندازه آمیری مقادیرناچیز و حساس دارو (و حتی سنجش دوزهای دارویی کم در سامانه های زیست–حیاتی) مورداستفاده قرار گیرد. از دیگر مزایای این روش، ساده گی روش، ساده گروش، داره این روش، میانه دای روش در مقایسه با روش آن و در می میان در این روش، ساده گی روش، برسی- مان و زمان آزمون کوتاه این روش در مقایسه با روش میان دیگر است. بنابراین، روش پیشنهادی می تواند برای برسی- های فارماکوکینتیکی مناسب باشد.

منابع و مراجع

 Behera, S., Ghanty, S., Ahmad, F., Santra, S., & Banerjee, S. (2012). UV-visible spectrophotometric method development and validation of assay of paracetamol tablet formulation. J Anal Bioanal Techniques, 3(6), 151-7.
 Prescott, L. F. (1983). Paracetamol overdosage. Drugs, 25(3), 290-3141.



مطالعه محاسباتی ساختار الکترونی داروی پاراستامول با استفاده از نظریه کوانتومی اتم در مولکول (QTAIM)

سعیدہ پورھادی نجف آبادی'، رضا صفری' ، علی احسانی'

۱ - نویسنده مسئول : کارشناسی ارشد، شیمی گرایش شیمی فیزیک ، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه دانشگاه قم porhadi1997@gmail.com ۲ - دکتری، شیمی گرایش شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه دانشگاه قم R.Safari@qom.ac.ir ۸.Ehsani@qom.ac.ir - دکتری، شیمی گرایش شیمی فیزیک ،گروه شیمی، دانشکده علوم پایه دانشگاه قم

واژگان کلیدی: شیمی محاسباتی، نظریه کوانتومی اتم در مولکول، QTQIM، شیمی فیزیک دارویی، پاراستامول

۱–مقدمه

هدف از انجام این پژوهش، ارائه راهکاری (مدلی) ساده و کوانتومی جهت مطالعه ساختار الکترونی درون مولکولی داروی پاراستامول به منظور مشخص نمودن محل اتصال آن با حامل های دارویی (مانند گرافن) و بافت های حیاتی، با استفاده از نظریه کوانتومی اتم در مولکولی (QTAIM) می باشد. براساس QTAIM می توان یک سامانه مولکولی را به بخش های درون مولکولی بخش بندی نمود[2-1]. از این رو، در این پژوهش، سامانه مولکولی داروی پاراستامول به بخش های درون مولکولی راست (S_R)، می باشد. براساس QTAIM می توان یک سامانه مولکولی را به بخش های درون مولکولی بخش بندی نمود[2-1]. از این رو، در این پژوهش، سامانه مولکولی داروی پاراستامول به بخش های درون مولکولی راست (S_R)، بالا (S_R) و پایین (S_D) بخش بندی شد، شکل ۱. سپس، خواص الکترونی هر بستر اتمی و هر بخش درون مولکولی این سامانه مولکولی راست (S_R)، بالا (S_R) و پایین (S_D) بخش بندی شد، شکل ۱. سپس، خواص الکترونی هر بستر اتمی و هر بخش درون مولکولی این سامانه مولکولی این (S_D) بخش بندی مود مولکولی داروی پاراستامول به بخش های درون مولکولی راست (S_R)، بالا (S_D) و پایین (S_D) بخش بندی شد، شکل ۱. سپس، خواص الکترونی هر بستر اتمی و هر بخش درون مولکولی این سامانه مولکولی مورد مطالعه کوانتومی قرار گرفت. توجه شود که براساس QTAIM، متوسط خاصیت الکترونی (A) هر بخش درون مولکولی (A) متوسط خاصیت الکترونی (A) هر در این سامانه مولکولی مورد مطالعه کوانتومی قرار گرفت. توجه شود که براساس QTAIM، متوسط خاصیت الکترونی (A) هر بخش درون مولکولی (S_R) که دارای NI ایم ایست (S_R) آن بخش به دست می آید، به عبارت دیگر (Q) آن بخش به دست می آید، به عبارت دیگر (Q) می



شکل۱: ساختارمولکولی پاراستامول که به چهار بخش درون مولکولی تقسیم بندی شده است.

۲- روش

در ابتدا، ساختار مولکولی و الکترونی سامانه مولکولی بخش بندی شده داروی پاراستامول، شکل ۱، با استفاده از نظریه تابعیت چگالی DFT و در سطح محاسباتی B3LYP-6-311+G^{*} و با استفاده از نرم افزار گوسین G09 بهینه سازی شد. سپس، با استفاده از نظریه QTAIM و نرم افزار AIM2000، چگالی الکترونی، لاپلاسین انرژی جنبشی، انرژی ویریال (پتانسیل) و انرژی الکترونی، بستر های اتمی (Ω) و بخش های درون مولکولی (Sq) داروی پاراستامول محاسبه شد. برخی از نتایج به دست آمده در شکل (۲) و در جدول (۱) گزارش شده است.

مهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳



شکل۲: نقشه راه توزیع محلی چگالی الکترونی (RHO)، لانگرانژی انرژی جنبشی (KEG)،نیروی (پتانسیل) ویریال (VIR) و لاپلاس چگالی الکترون(Lap) برای سامانه مولکولی داروی پاراستامول، محاسبه شده با استفاده از نظریه کوانتومی DFT/QTAIM.

جدول۱: متوسط مقادیر عددی (برحسب .u.) برای چگالی الکترونی (RHO)، انرژی جنبشی (KEK) و انرژی الکترونی اتمی (E) محاسبه شده برای برخی از بسترهای اتمهای شاخص سامانه داروی پاراستامول با استفاده از نظریه های DFT/QTAIM

Atomic basins	Е	RHO	KEK	Lap(RHO)
(Ω)(در گروه عاملی OH)	-75.8757	9.1147	75.1541	9.2143×10 ⁻⁴
(NH در گروه عاملی) N (Ω)	-55.448	8.2229	54.9210	2.7980×10 ⁻³
(Ω)(در گروه عاملی CO)	-75.9769	9.2143	75.2543	-1.2641×10 ⁻⁴

۳- بحث و نتيجه گيري

تحلیل نتایج و بررسی نقشه راه خواص الکترونی محلی (اتمی) سامانه مولکولی پاراستامول نشان داد که این سامانه مولکولی را می توان به بخش های درون مولکولی دهندهالکترون و بخش گیرندهالکترون بخشبندی نمود. انتظار می رود، براساس این بخش بندی درون مولکولی بتوان به نقش هر بخش درون مولکولی و هر بستر اتمی سامانه مولکولی پاراستامول در توزیع بار و انرژی آن در حضور و در غیاب حامل های دارویی (مانند گرافن) پرداخت. این موضوع می تواند در مشخص نمودن جایگاه های انرژی آن در حضور و در غیاب حامل های دارویی (مانند گرافن) پرداخت. این موضوع می تواند در مشخص نمودن جایگاه های فعال (یا بخش های درون مولکولی فعال) و همچنین مطالعه سازوکار اتصال دارو به حامل های دارویی قبان می مودن جایگاه های فعال (یا بخش های درون مولکولی فعال) و همچنین مطالعه سازوکار اتصال دارو به حامل های دارویی گرافن از طرف فعال (یا بخش های مثال، یک نمونه از نتایج محاسبات تکمیلی نشان داد که اتصال این دارو به حامل دارویی گرافن از طرف بخش J محتمل تر است. به علاوه، گروه عاملی CO نقش بسزایی در سازوکار جذب سطحی (و به تبع آن M جذب) بخش دارو-حامل دارد. در آخر، انتظار می رود با توجه با استفاده از نظریه های کوانتومی در سامانه های باز کوانتومی، مانند(QTAIM)، تر است. در مطالعه بنیادین-کوانتومی سامانه های باز کوانتومی، مانند (QTAIM)، تر است. در مطالعه بنیادین-کوانتومی سامانه های باز کوانتومی، مانند(QTAIM)، تر است. در مطالعه بنیادین-کوانتومی سامانه های باز کوانتومی، مانند(QTAIM)، بتوان افق های پژوهشی جدیدی در مطالعه بنیادین-کوانتومی سامانه های دارد. و زمیست حیاتی مشخص نمود با توجه با استفاده از نظریه های کوانتومی در سامانه های باز کوانتومی، مانند(QTAIM)، بتوان افق های پژوهشی جدیدی در مطالعه بنیادین-کوانتومی سامانه های باز کوانتومی، مانند(QTAIM) می رود با توجه با استفاده از نظریه های کوانتومی در سامانه های باز کوانتومی، مانند(QTAIM) می رود با توجه با سامانه های داروی و زیست حیاتی (در مقیاس اتمی) گشود.



منابع و مراجع

1. Matta, C. F., & Boyd, R. J. (2007). An introduction to the quantum theory of atoms in molecules. The quantum theory of atoms in molecules, 1-34

2. Hadi, H.; Safari, R.. Optical and Quantum Electronics 2024, 56 (4), 575



دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

سحر پولادرگ'، دلارا محمد آقایی' ، عبدالرضا نکویی''، محسن سروری'، سمانه برومند⁴

saharpooladrag@gmail.com ا- دانشجوی ارشد، شیمی فیزیک، شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز، saharpooladrag@gmail.com ۲- نویسنده مسئول، دانشیار، شیمی فیزیک، شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز، nekoei@sutech.ac.ir ۳- دانشیار، شیمی فیزیک، شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز، sorouri@sutech.ac.ir ۴-استادیار، شیمی فیزیک، شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز، echemi.boromand@gmail.com

واژگان كليدى: آلبومين سرم خون انسانى، ديفن هيدرامين، طيف سنجى فلورسانس، شبيه سازى ديناميک مولکولى

۱–مقدمه

آلبومین سرم انسانی، فراوان ترین پروتئین در پلاسمای خون، از ۵۸۵ آمینواسید تشکیل شده و دارای ویژگیهای فیزیولوژیکی مانند فعالیت ضد انعقادی و ضد التهابی است. این پروتئین به عنوان ناقل اصلی برای انتقال مولکولهای درونزا و برونزا، از جمله داروها، عمل میکند. اتصال دارو به آلبومین، توزیع و نیمه عمر پلاسمایی آن را افزایش داده و سرعت پاکسازی دارو را کاهش میدهد. بنابراین، آلبومین نقش کلیدی در ذخیره و توزیع داروها ایفا میکند.[۱]. دیفن هیدرامین با نام تجاری بنادریل، یک داروی آنتی هیستامین نسل اول با خصوصیات ضد کولینرژیک است که با مسدود کردن اثرات هیستامین، (مادهای طبیعی که بدن در طول یک واکنش آلرژیک تولید میکند)، عمل میکند. دیفن هیدرامین به عنوان دارو برای درمان آلرژی، بیخوابی، خارش، لرزش در پارکینسونیسم و همچنین نشانههای سرماخوردگی استفاده میشود[۲]. این پژوهش، با هدف بررسی نحوه اتصال و تأثیر متقابل داروی دیفن هیدرامین و آلبومین انجام شده است.

۲- روشها

۲-۱ طيف سنجي فلورسانس

ابتدا، محلولی از پروتئین آلبومین با غلظت ۵ میکرولیتر تهیه و به سل درون دستگاه تزریق شد. طیف فلورسانس اولیه آلبومین به عنوان مرجعی برای مقایسه با طیفهای بعدی ثبت گردید. سپس، به تدریج مقادیر ۳ میکرولیتر از محلول داروی دیفنهیدرامین ۳ میلی مولار به محلول آلبومین اضافه و پس از هر بار افزودن دارو، طیف فلورسانس جدیدی ثبت شد. این فرآیند تیتراسیون در ۱۰ مرحله و در دما، غلظت و طول موج های برانگیختگی متفاوت انجام شد (شکل۱).





شكل۱: (الف) طيف سنجي فلورسانس (ب) طيف سنجي فرابنفش-مرئي

۲-۳ شبیه سازی مولکولی

به منظور بررسی برهمکنش میان آلبومین و دارو، ابتدا یک شبیه سازی دینامیک مولکولی به مدت ۳۰۰ نانوثانیه با استفاده از نرم افزار گرومکس و میدان نیروی امبر انجام شد تا رفتار دینامیکی پروتئین در محیط آبی شبیه سازی شود. سپس، از روش داکینگ مولکولی با استفاده از نرم افزار اتوداک وینا برای پیش بینی حالت پایدار کمپلکس پروتئین-دارو و تعیین انرژی آزاد برهمکنش استفاده شد. در نهایت، کمپلکس به دست آمده از داکینگ به مدت ۳۰۰ نانوثانیه در شرایط شبیه به محیط فیزیولوژیکی بدن شبیه سازی شد تا پایداری و دینامیک آن در طول زمان بررسی شود (شکل۲).



شکل ۲ : اتصال دوبعدی داروی دیفن هیدرامین به (الف) آلبومین حاصل از کمپلکس داکینگ (ب) آلبومین شبیه سازی شده



۳-بحث و نتیجه گیری

بر اساس تحلیلهای طیف سنجی، کاهش معنی داری در شدت فلورسانس آلبومین (خاموشی فلورسانس) در حضور دیفن هیدرامین مشاهده نشد که میتواند نشانه عدم اتصال مستقیم دارو به اسید آمینههای فلورسنت تریپتوفان و تیروزین باشد. از سوی دیگر، تغییرات قابل توجهی در میکرومحیط فنیل آلانین در طیف سنجی فرابنفش-مرئی رخ داده است. شبیه سازیهای مولکولی نیز این یافتهها را تأیید کردند. نتایج اولیه داکینگ مولکولی نشانگر اتصال اولیه دارو به سایت IIIA آلبومین بود. با این حال، پس از شبیه سازی کمپلکس دارو-آلبومین در شرایط شبه فیزیولوژیکی بدن، تغییراتی در این برهمکنش ایجاد شد و دارو به واسطه اسیدآمینه فنیل آلانین به سایت IIA

منابع و مراجع

Molaei, P., Mahaki, H., Manoochehri, H., & Tanzadehpanah, H. (2022). Binding sites of anticancer drugs on human serum albumin (HSA): a review. *Protein and peptide letters*, 29 (8), 651-675.
 Wolfson, A. R., Wong, D., Abrams, E. M., Waserman, S., & Sussman, G. L. (2022). Diphenhydramine: time to move on?. *The Journal of Allergy and Clinical Immunology: In Practice*, 10 (12), 3124-3130.



مطالعه محاسباتی بهداماندازی گاز CO₂ بر روی ساختارC68-گرافاین تزئین شده با فلز Al

زهرا تابنده'، عادل رئیسی^۲

zah.tabandeh@gmail.com دانشگاه کاشان، acim.com
 دکتری شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه کاشان، areisi@kashanu.ac.ir

واژگان كليدى: بەداماندازى، C68-گرافاين، CO₂، DFT

۱– مقدمه

با گسترش فعالیتهای صنعتی، غلظت گاز CO2 در جو افزایش یافته و استفاده از سوختهای فسیلی نیز به دلیل افزایش تقاضای انرژی، چند برابر شده است. بنابراین آلودگی ناشی از این گاز سلامت انسان را به طور جدی به خطر انداخته و باعث تغییرات سریع آب و هوایی نیز شده است (Oschatz,2018). از این رو فعالان و محققان محیط زیست، برای رفع این مشکلات تحقیقات زیادی انجام دادهاند و یکی از رایجترین راه حل ها، جذب و به دام انداختن گاز CO2 است. از آن جایی که ساختارهای کربنی برهمکنش های موثری با گاز CO2 برقرار نمی کنند، در این پژوهش قابلیت ساختار تزئین شده C68-گرافاین با فلز A1، برای به دام اندازی این گاز مورد مطالعه قرار گرفته است.

۲- روش انجام محاسبات

در این مطالعه با استفاده از ماژول DMol³ و به کارگیری نظریهی تابعی چگالی اصلاح شده DFT-D2 محاسبات مربوط به بهینهسازی هندسی و خواص الکترونیکی انجام شده است. در این محاسبات از تقریب GGA، تابعی PBE، مجموعه پایه عددی DNP استفاده شده است. انرژی جذب گاز CO₂. همچنین مقدار بهینهی ۱٬k×۲×۲ در نظر گرفته شده است. انرژی جذب گاز CO₂ روی ساختار خالص و آلاییده شده شده شده است:

 $E_{ads} = [E_{(Al-sheet-CO2)} - (E_{(Al-sheet)} + E_{CO2})]$

۳-بحث

(1)

 صورت مایل قرار گرفته است. زاویه C-O-C در مولکول گازی CO2 پس از جذب روی C68-گرافاین تزئین شده با اتم AI بر ۱۷۹/۵ درجه کاهش می یابد. مقدار انرژی جذب مولکول CO2 روی ساختار-C68 گرافاین تزئین شده با اتم AI برابر V۳ ۹۷/۰-می باشد. در واقع، مقدار انرژی جذب مولکول CO2 روی C68-گرافاین تزئین شده با اتم AI نسبت به ساختار C68-گرافاین خالص تقریباً دو برابر شده است. همان طور که برای ساختار کربنی گرافداین نیز گزارش شده است (Tabandeh,2023). نمودار مواک مربوط به ساختار AI-C68-GY، برای براحی خواص الکترونی جذب مولکول CO2 روی ساختار Tabandeh,2023). نمودار شده با اتم AI، سهم حالات محتلف هیبریداسیون و انتقالات بار، در شکل (۱) نشان داده شده است. در طبق شکل، در این ساختار ، اوربیتالهای p اتم های کربن سهم قابل توجهی در سطح فرمی دارند. همچنین، اوربیتالهای p مولکول CO2 دارای سهم ناچیزی در باند هدایت هستند. در حالی که اوربیتالهای p اتم AI سهم عمدهای در باند هدایت این ساختار دارد. نمودار اختلاف چگالی بار، کاهش چگالی بار روی سطح و انباشتگی بار روی مولکول CO2 را نشان میدهد. انباشتگی بار در فضای بین



شکل ۱: الف) نمای از بالا و از روبروی جذب مولکول CO2 روی ساختار C68-گرافاین تزئین شده با فلز Al، ب) نمودار اختلاف چگالی بار در طی فرایند جذب. رنگ بنفش انباشتگی و رنگ زرد کاهش چگالی بار برای هم سطح e/Å³ ۰/۰۰۴ را نشان میدهد ج) چگالی حالتهای جزئی این ساختار

۴- نتیجهگیری

در این مطالعه جذب مولکول CO2 روی سطح C68-گرافاین تزئین شده با فلز Al به روش محاسبات DFT انجام شده است. انرژی جذب مولکول گاز روی این ساختار eV/- است که برهم کنش موثر آن را نشان میدهد. مطابق با نمودار PDOS، همپوشانی پیکهای اوربیتالهای p اتم Al با مولکول CO2. انرژی جذب بیشتر این مولکول را در مقایسه با ساختار خالص تایید می کند. بنابراین ساختار C68-گرافاین تزئین شده با فلز Al میتواند به عنوان جاذب گاز آلاینده CO2 به کار رود.

منابع و مراجع

[1] M. Oschatz, M. Antonietti, A search for selectivity to enable CO2 capture with porous adsorbents, Energy & Environmental Science, 11 (2018) 57-70.

[2] B. Delley, Hardness conserving semilocal pseudopotentials, Physical Review B, 66 (2002) 155125.





طراحی و سنتز یک چارچوب آلی-کوالانسی مزدوج جدید بر پایه پریلن و کاربرد آن در تبدیل نور-گرمای انرژی خورشیدی و نمک زدایی از آب دریا

مرتضی ترابی'، سعید عزیزیان^۲

۱ – دکتری شیمی آلی، گروه شیمی آلی، دانشکده شیمی، دانشگاه بوعلی سینا، همدان (Email: torabimorteza74@yahoo.com) ۲–استاد شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه بوعلی سینا، همدان (Email: sazizian@basu.ac.ir)

واژگان کلیدی: چارچوب آلی-کووالانسی، پریلن، تبدیل نوری-گرمایی، انرژی خورشیدی.

۱– مقدمه

در سالهای اخیر، استفاده از انرژی خورشیدی در فرایندهای نوری-گرمایی و کاربرد آن جهت تصفیه آب به دلیل دسترسی به منبع نامحدود انرژی خورشیدی، ارزان بودن، و بازده بالا مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. اساس عملکرد روشهای نور-گرمایی در تصفیه آب شامل استفاده از مواد جاذب نور خورشید میباشد. این ترکیبات به طور قابل ملاحظهای نور خورشید را جذب کرده و منجر به افزایش دمای سیستم میشوند که این عامل منجر به تبخیر سطحی آب و تقطیر آن به عنوان آب تصفیه شده میباشد. از جاذبهای مختلفی از قبیل نیمه رساناهای معدنی، پلیمرهای متخلخل آلی و اکسید فلزات به منظور تعفیه شده میباشد. از جاذبهای مختلفی از قبیل نیمه رساناهای معدنی، پلیمرهای متخلخل آلی و اکسید فلزات به منظور و آبدوست خود آب جذب شده در سطح خود را تبخیر کرده تا تبخیر در دمای پایین انجام شود [۲-۱]. چارچوبهای آلی-کووالانسی (COFs) به عنوان یکی از مهمترین دستههای پلیمرهای متخلخل آلی، نقش بسزایی در پیشرفت علوم و فناوریهای نوین دارند. این ترکیبات به طور همزمان شامل مزایای پلیمرهای متخلخل آلی، نقش بسزایی در پیشرفت علوم و فناوریهای ویژگیهای منحصر به فردی از جمله نسبت سطح به حجم زیاد، ساختار کریستالی منظم، دانسیته کم، قابلیت تنظیم منافذ، و فرایندهای تبرکیبات به طور همزمان شامل مزایای پلیمرهای متخلخل آلی، نقش بسزایی در پیشرفت علوم و فناوریهای ویژگیهای منحصر به فردی از جمله نسبت سطح به حجم زیاد، ساختار کریستالی منظم، دانسیته کم، قابلیت تنظیم منافذ، و موزایندهای تبلیاری گرمایی و شیمیایی بالا هستند. این ترکیبات کاربردهای بسیار زیادی در زمینههای مختلی از جمله کاتالیزورها، فرایندهای تبدیل نوری-گرمایی، ذخیرهسازی و جداسازی گازها، ابزارهای الکترونیکی، باتریها و ابرخازنها و دارورسانی هدفمند دارند [۴–۳]. با در نظر گرفتن موارد ذکر شده، در این پژوهش چارچوب آلی-کووالانسی بر پایه پریلن به طور موفق آمیزی سنتز شد و جوم تبدیل نوری-گرمایی و نمک زدایی از آب دریا از طریق تبخیر سطحی به کار برده شد (شکل ۱).

۲- بحث و نتیجهگیری

چارچوب آلی-کوالانسی سنتز شده با نام اختصاری PCOF با استفاده از روشهای مختلفی از قبیل FESEM ،FT-IR، پار وقه ای TGA و TGA مورد شناسایی و ارزیابی قرار گرفت. طبق نتایج حاصل از تصاویر FESEM، این ترکیب دارای اشکال ورقه ای گل برگی میباشد. همچنین طبق نتایج حاصل از الگوی XRD چارچوب آلی-کووالانسی سنتز شده، وجود پیکهای تیز در زوایای ۱۴/۰۴، ۱۹/۰۷، ۱۹/۷۸، ۲۳/۵۵ و ۲۴/۵۳ نشان دهنده ساختار کریستالی منظم برای این ترکیب میباشد (شکل




شكل ۲: تصوير آناليز FESEM (الف) و الگوى XRD (ب) براى PCOF

پس از سنتز و شناسایی ترکیب PCOF، از آن به عنوان جاذب نور خورشید جهت نمکزدایی از آب دریا استفاده شد. در این راستا، ترکیب PCOF در معرض نور شبیه ساز خورشیدی با شدت ۱sun قرار گرفت و میزان افزایش دما بر حسب زمان مورد بررسی قرار گرفت. طبق نتایج به دست آمده از تصاویر دوربین مادون قرمز، دمای این ترکیب در مدت زمان ۱۰ دقیقه تا ۶۷/۱ افزایش یافت (شکل (الف)۳). همچنین، نمودار میزان تبخیر آب در واحد سطح نسبت به زمان ترسیم شد و طبق نتایج به دست آمده از شیب نمودار، سرعت تبخیر آب با استفاده از PCOF به میزان ¹⁻¹ kg.m



شکل ۳: نمودار تغییرات دما بر حسب زمان با استفاده از PCOF به عنوان جاذب نور خورشید (الف) و نمودار میزان تبخیر در واحد سطح بر حسب زمان و بررسی سرعت تبخیر آب با استفاده از PCOF در شدت نور ۱ sun (ب).



مراجع

[1] Jin, X., Li, Y., Li, W., Zheng, Y., Fan, Z., Han, X., ... & Zhu, Z. (2019). Nanomaterial design for efficient solar-driven steam generation. ACS applied energy materials, 2 (9), 6112-6126.

[2] Shi, L., Wang, X., Hu, Y., He, Y., & Yan, Y. (2020). Solar-thermal conversion and steam generation: a review. Applied Thermal Engineering, 179, 115691

[3] Segura, J. L., Royuela, S., & Ramos, M. M. (2019). Post-synthetic modification of covalent organic frameworks. Chemical Society Reviews, 48 (14), 3903-3945.

[4] Ding, S. Y., & Wang, W. (2013). Covalent organic frameworks (COFs): from design to applications. Chemical Society Reviews, 42 (2), 548-568.



ساخت کربن پارچه ای با سطوح ابر آبگریز –ابر آبدوست برای تبخیر خورشیدی در سطح مشترک

حانیه تهذیبی'، سعید عزیزیان'

(haniye.th@gmail.com) د انشجوی دکتری ، شیمی فیزیک، شیمی و علوم نفت، دانشگاه بوعلی سینا، همدان ۲- استاد، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و علوم نفت، دانشگاه بوعلی سینا، همدان (sazizian@basu.ac.ir)

واژگان کلیدی: تبخیر خورشیدی، فصل مشترک، فوتوترمال، نمک زدایی آب شور، کربن پارچهای

۱– مقدمه

امروزه یکی از چالش هایی که جامعهی بشری با آن مواجه است، کمبود آب شیرین میباشد. علارغم اینکه قسمت عمدهی سطح کرهی زمین را آب فراگرفته است، ولی تنها حدود ٪۲.۵ از آن، اختصاص به آب شیرین دارد [۱]. باتوجه به رشد جمعیت، افزایش آلودگی آب ها، رشد صنایع، مشکلات زیست محیطی، تامین آب شیرین به یکی از چالش های مهم جامعهی جهانی تبدیل شدهاست. یکی از روش های مفید برای تامین آب شیرین، نمک زدایی آب شور میباشد. روش های مختلفی با هدف نمک زدایی آب شور وجود دارد، از جمله میتوان به روش های: اسمز معکوس، نمک زدایی با استفاده از غشاء و تقطیر چند مرحله ای اشاره کرد. روش های ذکر شده دارای یک سری معایب میباشند از جمله: مقرون به صرفه نیستند، نیاز به مصرف زیاد انرژی دارند و همچنین منجر به نشر مقادیر زیاد کربن دی اکسید می شوند. یکی از کاندید های مفید و عالی منبع انرژی جایگزین، خورشید میباشد، زیرا خورشید بزرگ ترین منبع انرژی تجدید پذیر کرهی زمین است. روش تولید بخار خورشیدی با هدف نمک زدایی آب شور مورد توجه پژوهشگران گرفته است. اساس این روش، تبدیل انرژی خورشیدی به گرما و به دنبال آن تولید بخار از آب و در نهایت زدودن انواع آلودگی ها از آب است. پارامتر کلیدی در این سیستم ها استفاده از مواد فوتوترمال است، که وظیفهی آن ها جذب انرژی خورشید با حداقل بازتاب و نشر نور است. مواد فوتوترمال را میتوان به چند دسته تقسیم بندی کرد كه شامل: مواد كربني [٢] ، پليمر ها [٣]، مواد نيمه رسانا [۴]، زيست توده ها [۵] و نانوساختار هاي فلزي [۶] است. از بين انواع سیستم های تبخیر خورشیدی، سیستم های تبخیر خورشیدی در سطح مشترک، بازده بالاتری دارند و بسیار مورد توجه قرار گرفته است. در این کار برای اولین بار با روش آسان، کم هزینه، سریع، جاذب نور برپایهی کربن با ترشوندگی متفاوت سنتز شد. ماده سنتز شده عملکرد بسیار خوبی درجذب موثر طیف تابشی خورشید دارد و سرعت تبدیل نور به گرما در آن بالا می باشد.

۲- روش

کربن پارچه ای که دارای رویه هایی با تر شوندگی متفاوت می باشد از طریق پوشش دهی یک رویه با نانو ذرات سیلیکای آبگریز تهیه شد[۷]. سپس نمونه در یک سیستم تبخیر در سطح مشترک همزمان با تابش دهی نور مورد مطالعه قرار گرفت.



۳- بحث و نتیجه گیری

اولین و مهمترین خاصیتی که باید مورد بررسی قرار گیرد، خاصیت فوتوترمال نمونهی سنتز میباشد. شکل (۱-الف) به خوبی نشان می دهد که نمونهی کربن پارچه ای سنتز شده قابلیت بسیار خوبی در جذب نور و تبدیل سریع آن به گرما را دارد و پس از دو دقیقه دمای سطح آن در اثر تابش نور با شدت W/m² ۲۰۰۰ تا ℃ ۲۰ افزایش می باید. به منظور بررسی عملکرد سیستم تبخیر خورشیدی در سطح مشترک، تغییرات جرم آب در اثر تبخیر به کمک تابش نور برای نمونهی کربن پارچه ای پوشش داده شده، نمونه کربن پارچه ای خالص و همچنین سیستم آبی عاری از نمونه، موردارزیابی قرار گرفت. همانطور که در شکل (۱-ب) نشان داده شده است حضور نمونه سنتزی در سیستم تولید بخار، منجر به کاهش جرم بیشتری شده و به دنبال آن، منجر به افزایش چشمگیرسرعت تبخیرآب شدهاست.



شکل۱:الف) نمودار تغییرات دمای سطح کربن پارچهای پوشش داده شدهی در حالت خشک تحت تابش نور و تاریکی، ب) تغییرات جرم آب با زمان برای نمونه ها ی مختلف تحت تابش نور با شدت۲۰۰ ۱۰۰۰

در ادامه اثرمتغیر های گوناگون بر بازده و سرعت تبخیر مورد مطالعه قرار می گیرد. دراین کار، با استفاده از روش سنتز سریع، نوین و با حداقل استفاده از انرژی، سیستم تبخیر خورشیدی در سطح مشترک بر پایه ی کربن ساخته شد. سیستم طراحی شده دارای بازده تبخیر بالا، سرعت تبخیر بالا (2.75 kg/m².h) و همچنین حداقل هدررفت انرژی میباشد، باتوجه به ویژگی های ذکر شده، این سیستم پتانسیل خوبی برای تبخیر خورشیدی در مقیاس بزرگ میباشد.

منابع و مراجع

[1] Khajevand, M., Azizian, S., & Boukherroub, R. (2021). Naturally abundant green moss for highly efficient solar thermal generation of clean water. ACS Applied Materials & Interfaces, 13(27), 31680-31690.

[2] Gan, Q., Zhang, T., Chen, R., Wang, X., & Ye, M. (2019). Simple, low-dose, durable, and carbon-nanotubebased floating solar still for efficient desalination and purification. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 7(4), 3925-3932.

[3] Li, C., Jiang, D., Huo, B., Ding, M., Huang, C., Jia, D., ... & Liu, J. (2019). Scalable and robust bilayer polymer foams for highly efficient and stable solar desalination. Nano Energy, 60, 841-849.

[4] He, W., Le Henaff, A. C., Amrose, S., Buonassisi, T., & Peters, I. M. (2021). Voltage-and flow-controlled electrodialysis batch operation: Flexible and optimized brackish water desalination. Desalination, 500, 114837.
[5] Sun, P., Zhang, W., Zada, I., Zhang, Y., Gu, J., Liu, Q., ... & Zhang, D. (2019). 3D-structured carbonized sunflower heads for improved energy efficiency in solar steam generation. ACS Applied Materials & Interfaces, 12(2), 2171-2179.



[6] Yu, B., Wang, Y., Zhang, Y., & Zhang, Z. (2023). Nanoporous black silver film with high porosity for efficient solar steam generation. *Nano Research*, *16*(4), 5610-5618.

[7] Tahzibi, H., Azizian, S., Szunerits, S., & Boukherroub, R. (2022). Fast capture, collection, and targeted transfer of underwater gas bubbles using Janus-faced carbon cloth prepared by a novel and simple strategy. ACS Applied Materials & Interfaces, 14(39), 45013-45024.



مطالعه نظری جذب داروهای هیدروکسی اوره، مرکاپتوپورین و تیوگوانین توسط MOFهای مبتنی بر تیتانیوم به روش GCMC

سولماز تيمورزاده، سعيد يگانگي

گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی دانشگاه مازندران، (sdyeganegi@gmail.com) teymourzadehsulmaz@gmail.com

کلید واژه: دارورسانی- چارچوب فلز آلی- ضد سرطان- شبیه سازی مونت کارلو

۱–مقدمه

امروزه دارورسانی یکی از عرصههای مهم تحقیق دردنیاست که شامل بخشهای مختلفی همچون رسانش هدفمند دارو و کنترل سینتیکی رهایش دارو میباشد (۱) که ایمنی و کارایی درمان را بهبود میبخشد. از این رو در سالهای اخیر، تعداد ترکیبات مورد استفاده به عنوان سیستمهای دارورسانی افزایش چشمگیری داشتهاند (۲). چارچوبهای فلز-آلی مبتنی بر تيتانيوم باتوجه به ويژگيهاي مطلوبي كه دارند، ازجمله قابليت بازيافت، فراواني Ti در يوسته زمين و ارزان بودن آن، منافذ قابل تنظیم، سمیت کم، تنوع ساختاری به عنوان یکی از جذابترین چارچوبهای فلز-آلی در نظر گرفته میشوند. لازم به ذکر است که این چارچوبهای فلز-آلی نسبت به سایر چارچوبها از جمله Fe بسیار کمیاب می باشند (۳). سرطان دومین علت مرگ و میر درجهان می باشد واحتمال ابتلا به این بیماری درحال افزایش است (۴). در این میان داروها و روش درمانی زیادی برای سرطان ارائه شده است که عوارض جانبی زیادی به همراه دارند. بنابراین بسیاری از محققان بدنبال راهی برای کاهش عوارض جانبی در درمان سرطان میباشند (۵). هیدروکسی اوره، مرکاپتوپورین، تیوگوانین ۳ مورد از داروهایی میباشند که در درمان سرطان کاربرد دارند. هیدروکسی اوره در درمان سرطان پستان، سرطان خون، بیماری سلول داسی شکل و HIV استفاده می شود (۴). مرکاپتوپورین، در درمان انواع سرطان خون، بیماری التهابی روده و تالاسمی قابل استفاده است (۷). تیوگوانین نیز بطور قابل توجهی باعث توقف رشد در سلولهای سرطان خون می شود (۸). در سال ۲۰۰۹، سرر و همکارانش از ساخت اولین چارچوب فلز-آلی مبتنی بر تیتانیوم خبر دادند (۹) که با استفاده از روش حلال گرمایی بدست آمد. با استفاده از همین روش، طی جایگزینی اسید ترفتالیک با اسید ۲-آمینوترفتالیک، MIL-125-NH نیز تهیه شد (۱۰). گروه آمینی (۲NH)موجود در TMIL-125-NH مي تواند تعامل قوى بين دارو و MOF را ايجاد كند (١١). بررسي ها نشان دادند كه چهار چوبهاي فلز-آلي TMIL-125-NH و MIL- مزاياي قابل توجهي از جمله سنتز آسان، زيست سازگاري، مقاومت بالا در برابر حرارت و مساحت سطح بالا که منجر به ظرفیت بالا برای بارگذاری دارو می شود، را دارند. در نتیجه جذب داروهای ضدسرطان نام برده شده توسط این دو MIL که تا به امروز صورت نگرفته می تواند مفید باشد (۱۲). هدف از این پژوهش ، مطالعه جذب داروهای ضد سرطان شامل: هیدروکسی اوره، مرکاپتوپورین و تیوگوانین ، توسط ۲۵۲-۱25-۲MIL و با استفاده از روش شبیهسازی مونت کارلو در مجموعه بندادی بزرگ (GCMC) ، که دستیابی به اطلاعات ارزشمند در سطح اتمی را فراهم می آورد، صورت می گیرد. با استفاده از یافتههای این مطالعات امید است که بتوان راهکارهایی برای طراحی مواد موثرتر برای جذب و رهاسازی این داروها در بدن ارائه کرد.

۲- روش کار

در این پایان نامه جهت استخراج دادهها از روشهای شیمی محاسباتی مانند شبیه سازی مونت کارلو استفاده میشود. از نرم افزارهای شیمی محاسباتی در محیطهای ویندوز و لینوکس و همچنین از نرم افزارهایی مانند اکسل جهت آنالیز و ترسیم نمودارها استفاده میشود.

۳-نتیجه گیری

شبیهسازی مونت کارلو نشان میدهد که حاملهای MIL-125 و MIL-125-NH با ظرفیتی بالا داروهای ضد سرطان ذکر شده در این مقاله را بارگیری می کنند.

منابع

1.Ma, Z., & Moulton, B. (2011). Recent advances of discrete coordination complexes and coordination polymers in drug delivery. Coordination Chemistry Reviews, 255(15-16), 1623-1641. DOI: 10.1016/j.ccr.2011.01.031 2.Hyjek, K., & Jodłowski, P. (2023). Metal-organic frameworks for efficient drug adsorption and delivery. Scientiae Radices, 2, 115-189. DOI: 10.58332/scirad2023v2i2a03

3.Xia, Q., Huang, B., Yuan, X., Wang, H., Wu, Z., Jiang, L., ... & Wang, H. (2018). Modified stannous sulfide nanoparticles with metal-organic framework: Toward efficient and enhanced photocatalytic reduction of chromium (VI) under visible light. Journal of Colloid and Interface Science, 530, 481-492. DOI: 10.1016/j.jcis.2018.05.015

4.Altememy, D., Khoobi, M., Javar, H. A., Alsamarrai, S., & Khosravian, P. (2020). Synthesis and Characterization of Silk Fibroin-Coated Mesoporous Silica Nanoparticles for Tioguanine Targeting to Leukemia. International Journal of Pharmaceutical Research (09752366). DOI: 10.31838/ijpr/2020.SP2.145 5.Pérez-Herrero, E., & Fernández-Medarde, A. (2015). Advanced targeted therapies in cancer: Drug nanocarriers, the future of chemotherapy. European journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics, 93, 52-79. DOI: 10.1016/j.ejpb.2015.03.018

6.Hsu, L., Nnodu, O. E., Brown, B. J., Tluway, F., King, S., Dogara, L. G., ... & Tayo, B. O. (2018). White paper: pathways to progress in newborn screening for sickle cell disease in sub-Saharan Africa. Journal of Tropical Diseases & Public Health, 6(2). DOI: 10.4172/2329-891X.1000260

7.Sahasranaman, S., Howard, D., & Roy, S. (2008). Clinical pharmacology and pharmacogenetics of thiopurines. European Journal of Clinical Pharmacology, 64, 753-767. DOI: 10.1007/s00228-008 0478-6 8.Munshi, P. N., Lubin, M., & Bertino, J. R. (2014). 6-thioguanine: a drug with unrealized potential for cancer therapy. The Oncologist, 19(7), 760-765. DOI: 10.1634/theoncologist.2014-0178

9.Nguyen, H. L. (2017). The chemistry of titanium-based metal-organic frameworks. New Journal of Chemistry, 41(23), 14030-14043. DOI: 10.1039/C7NJ03153J

10.Zlotea, C., Phanon, D., Mazaj, M., Heurtaux, D., Guillerm, V., Serre, C., ... & Latroche, M. (2011). Effect of NH2 and CF 3 functionalization on the hydrogen sorption properties of MOFs. Dalton Transactions, 40(18), 4879-4881. DOI: 10.1039/C1DT10115C

11.Xie, Y., Liu, X., Ma, X., Duan, Y., Yao, Y., & Cai, Q. (2018). Small titanium-based MOFs prepared with the introduction of tetraethyl orthosilicate and their potential for use in drug delivery. ACS Applied Materials & Interfaces, 10(16), 13325-13332. DOI: 10.1021/acsami.8b01175

12.Chen, J., Wang, C., Zhu, Z. Y., Wang, F., Shang, J., Liu, Z., & Wang, L. (2024). Titanium-based metal-organic frameworks as pH-responsive drug delivery carriers of 5-Fluorouracil. Journal of Solid State Chemistry, 124563. DOI: 10.1016/j.jssc.2024.124563.



تهیه نانوکامپوزیت مکسین/ فلزات واسطه برای ابرخازنها: الکترودهای با کارایی بالا

مينا جانباز فوتمى' ، عبدالله عمرانى'، شهرام قاسمى مير"

۱ *- مینا جانباز فوتمی: دانشجو، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران (Janbazmina2020@gmail.com). ۲- استاد، شیمی فیزیک، پلیمر و سینتیک، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران (omrani@umz.ac.ir) ۳-دانشیار، شیمی کاربردی- نانوشیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران (sghasemimir@yahoo.com)

واژگان كليدى: ابرخازن، مكسين، ظرفيت ويژه، ماده الكترودى

۱– مقدمه

در سالهای اخیر با افزایش تقاضای جهانی انرژی و کاهش منابع انرژیهای تجدیدناپذیر، تغییر الگوهای آب و هوایی و توزیع نابرابر انرژی تقاضا برای سیستم های تبدیل انرژی دوست دار محیط زیست، سلول های سوختی پایدار، کوچک، سبک و انعطاف پذیر رو به افزایش است. باتریها و ابرخازنهای الکتروشیمیایی میتوانند به عنوان دستگاههای ذخیره انرژی مورد استفاده قرار گیرند. ابرخازنها ذخیرهسازهای الکتروشیمیایی هستند که از سه جزء ضروری الکترود. الکترولیت و جداکننده تشکیل شده و قرار گرفتهاند. ترکیبات فلزی مواد کربنی، اکسیدهای فلزی و پلیمرهای رسانا به عنوان مواد الکترودی ابرخازن مورداستفاده قرار گرفتهاند. ترکیبات فلزی مورداستفاده در الکترود ابرخازن باید دارای سه ویژگی باشند: (الف) باید هدایت الکتریکی بالایی داشته باشند، (ب) باید دارای بیش از دو ظرفیت باشند و همچنین ساختار بلوری آنها با تغییر ظرفیت فلز دچار تحول نشود و نیاص، M شمین عنصری است که دارای بیش از دو ظرفیت باشند و همچنین ساختار بلوری آنها با تغییر ظرفیت فلز دچار تحول نشود و در آلیاژها تشکیل دهد به همین دلیل بیش از دو ظرفیت باشند و همچنین ساختار بلوری آنها با تغییر ظرفیت فلز دچار تحول نشود و عناص، M شمین عنصری است که دارای بالاترین نقطه ذوب است. این عنصر به آسانی میتواند کاربیدهای سخت و پایدار را یالا و سوپر آلیاژها قرار گرفته است. مکسینها متشکل از ورقههای مولکولی از جنس کاربیدهای فولادی، آلیاژهای با کشش در آلیاژها تشکیل دهد به همین دلیل بیشتر تولید جهانی این عنصر در راستای تولید انواع آلیاژهای فولادی، آلیاژهای با کشش یالا و سوپر آلیاژها قرار گرفته است. مکسینها متشکل از ورقههای مولکولی از جنس کاربیدها و نیتریدهای سخت و پایدار را تیتانیوم میباشند. از این رو، برخلاف اکثر سرامیکهای دوبعدی، ذاتاً دارای رسانایی خوب و ظرفیت حجمی بالای هستند. در این پژوهش در واقع تلاش بر آن است تا در جهت بهبود عملکرد الکتروشیمیایی ماده الکترودی مورد استفاده در ابرخازنها، از

۲- روش

برای ساخت الکترودها ابتدا ورقه فوم نیکلی به قطعاتی به مساحت ۱ cm برش زده شد. جهت چربی زدایی این قطعات، از اتانول به مدت ۱۱ دقیقه در حمام فراصوت استفاده شد. سپس برای حذف لایه اکسیدی به مدت ۱۱ دقیقه در محلول (HCl 6 M) تحت تابش امواج فراصوت در حمام فراصوت قرار داده شد. در نهایت قطعات فوم نیکل با آب مقطر شستشو داده شدند و در گرمخانه در دمای C^oC ۵۱ به مدت h خشک گردید. از این قطعات تمیز شده برای ساخت الکترود استفاده شد. برای ساخت هر الکترود جهت مطالعات الکتروشیمیایی، نانوهیبرید، کربن سیاه و PVDF، به عنوان عامل چسبنده، به ترتیب با نسبت وزنی ۵:۱۱:۵۱ مخلوط و با استفاده NMP کاملاً همگن شدند تا حالت خمیری به دست آید. در مرحله بعد، خمیر همگن تهیه شده بر روی سطح فوم نیکل کاملاً پخش شد و بعد از ترسیب نانوهیبرید روی فوم نیکل، الکترود در گرمخانه در دمای C^oC تحت اتمسفر هوا به مدت ۱۱ ساعت خشک گردید.

عهان ۲۹ و ۳۰ پاران ۲۴۰۳

۳- بحث

برای بررسی رفتار ابرخازنی الکترودها از ولتاموگرام چرخهای که روشی کارآمد و سریع برای نشان دادن رفتارهای یک ابرخازن را دارد، استفاده میشود. تمامی مطالعات الکتروشیمیایی الکترودها با استفاده از سیستم سه الکترودی انجام گرفت که در آن الکترودهای تهیه شده به عنوان الکترودهای کار و صفحه پلاتین به عنوان الکترود کمکی استفاده شد و پتانسیلها نسبت به الکترود مرجع (اشباع AgCl|Ag)|KCl بررسی شد. از محلول آبی KOH 2 M به عنوان الکترولیت در تمامی مطالعات ابرخازنی استفاده شد.



شکل ۱- ولتاموگرامهای چرخهای الکترودهای MoS2 و MXene-MoS2 ترسیب شده

در ولتاموگرامهای چرخهای الکترودهای MOS₂ وMOS₂ میتوان نتیجه گرفت که ذخیره بار در الکترودگرام چرخهای MXene-MoS₂ وMOS₂ میتوان نتیجه گرفت که ذخیره بار در الکترودS2 الکترود نانوهیبرید و MOS₂ بیشتر میباشد. این بدین معنا است که ظرفیت خازنی نیز افزایش مییابد. در پژوهش حاضر ابتدا مولیبیدن دی سولفید به روش گرمابی سنتز شد و سپس به همین ترتیب، نانوهیبرید مکسین – مولیبدن دی سولفید سنتز می شود و با استفاده از روشهای دستگاهی مناسب نظیر FTIR و XRD مورد شناسایی قرار گرفتند. در ادامه رفتار الکتروشیمیایی ترکیبات موردنظر و نیز عملکرد ابرخازنهایی که بر پایه این ترکیبات ساخته شدند، با استفاده از روشهای ولتامتری چرخهای،

۴- نتیجهگیری

روش گرمابی و سونوشیمی یک روش مناسب و کارآمد برای سنتز نانوذرات میباشند. بنابراین میتوان از این روش برای سنتز بهتر نانوذرات استفاده کرد. با بررسی رفتارهای الکتروشکیمیایی نانوهیبرید مولیبیدن دی سولفید-مکسین این ماده برای ابرخازن مناسب بود. با مطالعات انجام شده مشخص شد که پایداری مناسب مولیبیدن دی سولفید-مکسین حاصل رفتار ظرفیت مناسب





استفاده از بیونانوکامپوزیت پلیمر/چارچوب فلزی-آلی به عنوان یک جاذب جدید برای جذب انتخابی آنتیاکسیدانهای طبیعی

اعظم جباری' ، مرتضی جباری'، احسان نظرزاده زارع'

۱-نویسنده مسئول: دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه دامغان (a.jabbari6893@gmail.com) ۲- دانشیار، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه دامغان (m_jabari@du.ac.ir) ۳- دانشیار، شیمی پلیمر، دانشکده شیمی، دانشگاه دامغان (e.nazarzadeh@du.ac.ir)

واژگان كليدى: جذب سطحى انتخابى، بيونانوكامپوزيت، پليمر طبيعى، چارچوب فلزى-آلى، آنتى اكسيدان.

۱– مقدمه

۲- روش آزمایش

در این مطالعه، توانایی نانوکامپوزیت سنتز شده برای جذب چهار آنتیاکسیدان (کئورستین، نارینجنین، کریسین و هسپریدین) از محلولهای آلی/آبی با استفاده از آزمایشهای جذب ناپیوسته ارزیابی شد. برای هر آزمایش، ۱۰ میلیگرم از نانوجاذب در ۱۰ میلیلیتر محلول حاوی ۱۵ میلیگرم بر لیتر از هر آنتیاکسیدان در دمای ۲۹۸/۱۵ کلوین و به مدت ۳۰۰ دقیقه تحت هم زدن قرار گرفت. مقدار جذب هر آنتیاکسیدان با اسپکتروفتومتری UV-Vis و ترسیم منحنی کالیبراسیون با تعیین حداکثر جذب در طول موجهای بیشینه اندازه گیری شد. دادههای حاصل از سه آزمایش مستقل میانگین گیری و گزارش شدند. ظرفیت و درصد جذب نانوجاذب، همچنین ثابت جذب برای هر آنتیاکسیدان از طریق معادلات مربوطه تعیین شدند [۶]: $q_{c} = \frac{(C_0 - C_0)}{W}$ $R\% = \frac{C_0 - C_e}{C_0} \times 100$ $K_d = \frac{q_e}{C_e}$

که در آن W و V به ترتیب جرم نانوجاذب (گرم) و حجم محلول فلاونوئیدی (لیتر) را نشان میدهند. qe ظرفیت جذب تعادلی (میلیگرم بر گرم) ، Co و Co غلظت اولیه و غلظت تعادلی محلول فلاونوئیدهای مربوطه (میلیگرم بر لیتر) هستند.

والسكاد اصفيان ٢٩ و ٣٠ آيان ٢٠٣

۳- بحث و نتیجهگیری

(٢)

(٣)

۳–۱– آنالیزهای شناسایی جاذب

در شکل ۱-الف قلههای مشخصه UIO66-NH₂ و MnFe₂O4 در ۳۵/۵۴۶^o و ۴/۶۴۹^o،۷/۳۹۳^o = ۲۵ سنتز موفق نانوکامپوزیت را نشان میدهند. همچنین، در طیف FT-IR نانوکامپوزیت، پیکهای مشخصه در ۶۱۸ cm⁻¹ و ۱۶۱۷ و ۳۴۱۳ به ترتیب به UIO66-NH₂ ،MnFe₂O4 و پلیمر طبیعی صمغ عربی نسبت داده میشوند که تأییدکننده سنتز موفق آن است. میکروگراف FE-SEM نانوکامپوزیت FE-SE4 نانوکامپوزیت AG-g-PANI@MnFe₂O4/UIO66-NH₂ با بزرگنمایی ۲ میکرومتر، تجمع ذراتی با قطر کمتر از را میکرومتر و ساختار آمورف و بینظم را نشان میدهد.



شكل ۱- (الف) طيف XRD، (ب) ميكروگراف FE-SEM و (ج) طيف FT-IR نانوكامپوزيت

۲-۲- گزینش پذیری نانو کامپوزیت

شکل ۲-الف و دادههای جدول ۱ نشان میدهند که نانوکامپوزیت بیشترین جذب را برای کئورستین دارد و گزینش پذیری بالایی نسبت به این آنتیاکسیدان نشان میدهد. همچنین، ثابت جذب بالاتر کئورستین نشاندهنده تمایل بیشتر جاذب به جذب و جداسازی بهتر آن از محلول است. در شکل ۲- ب نیز طیفهای UV-Vis مربوط به دو محلول کئورستین و کریسین، قبل و بعد از اضافه کردن جاذب مشاهده میشود که از روی تفاوت قلهها میتوان پی برد که تمایل جاذب نسبت به جذب کئورستین بیشتر است. جدول ۱: مقدار ظرفیت، درصد جذب و ثابت جذب آنتیاکسیدانهای مختلف روی سطح نانوکامپوزیت

	ثابت جذب (L.g ⁻¹)	درصد جذب (./)	ظرفیت جذب (mg.g ⁻¹)	آنتىاكسيدان
	۱/۳۵۹۸	۵۷/۶۲۳۳	٨/٧٦٢	كئورستين
	•/٣٢٨٣	24/118	٣/٨٩٣٢	ھسپريدين
	۰/۲۰۱۶	18/777	۲/۶۰۸۳	نارينجنين
I	٠/•٩۵٩	٨/٧۵۴٣	1/8849	كريسين



شکل ۲- (الف) نمودار درصد و ظرفیت جذب، (ب) طیف UV-Vis آنتیاکسیدانهای مورد بررسی قبل و بعد از عمل جذب سطحی

۳-۳- مکانیسم پیشنهادی برای جذب آنتیاکسیدانها

ساختار شیمیایی و گروههای عاملی جاذب و فلاونوئیدها در گزینش پذیری نقش اساسی دارند. نانوکامپوزیت-AG-g PANI@MnFe₂O4/UIO66-NH₂ با گروههای هیدروکسیل، کربوکسیل و آمین از طریق پیوندهای هیدروژنی، برهمکنشهای الکترواستاتیک و π-π به جذب مؤثر فلاونوئیدها کمک میکند. حضور بیشتر این گروههای عاملی، ظرفیت جذب را افزایش میدهد.

منابع و مراجع

1. Karrat, A., Palacios-Santander, J.M., Amine, A. & Cubillana-Aguilera, L. (**2022**). A novel magnetic molecularly imprinted polymer for selective extraction and determination of quercetin in plant samples. Analytica Chimica Acta, 1203, 339709.

2. Li, K., Chen, Zh., Liu, D.L., Zhang, X.Y., Ruso, J.M., Tang, Zh. & Liu, Zh. (**2018**). Effect of variable conditions on the adsorption selectivity of molecularly imprinted polymers. Advanced Composites and Hybrid Materials, 1, 777-784.

3. Dabaleh, A., Shojaei, A., Nematollahzadeh, A. & Molavi, H. (**2023**). Development of pH-Sensitive UiO-66/Polyaniline Nanohybrids with Self-Healing Anticorrosive Performance in Epoxy Coatings. Industrial & Engineering Chemistry Research, 67, 7447-7463.

4. Tajahmadi, S., Shamloo, A., Shojaei, A. & Sharifzadeh, M. (**2022**). Adsorption behavior of a gd-based metal– organic framework toward the quercetin drug: effect of the activation condition. ACS omega, 7, 41177-41188.

5. Hassanzadeh-Afruzi, F., Esmaeillzadeh, F., Heidari, G., Maleki, A. & Nazarzade Zare, E. (**2023**). Arabic gumgrafted-hydrolyzed polyacrylonitrile@ $ZnFe_2O_4$ as a magnetic adsorbent for remediation of levofloxacin antibiotic from aqueous solutions. ACS omega, 8, 6337-6348.



6. Chen, X., Sheng, Y., Che, J., Reymick, O.O. & Tao, N. (**2024**). Integration of covalent organic frameworks and molecularly imprinted polymers for selective extraction of flavonoid naringenin from grapefruit (Citrus × paradisi Macf.) peels. Food Chemistry, 21, 101107.



سینتیک رفتار جذب و واجذب سطحی یک رنگدانه طبیعی روی نانوکامپوزیت بیوپلیمری حاوی MOF و نانوذرات مغناطیسی

اعظم جباری' ، مرتضی جباری'، احسان نظرزاده زارع"

۱ - نویسنده مسئول: دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه دامغان (a.jabbari6893@gmail.com) ۲ - دانشیار، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه دامغان (m_jabari@du.ac.ir) ۳- دانشیار، شیمی پلیمر، دانشکده شیمی، دانشگاه دامغان (e.nazarzadeh@du.ac.ir)

واژگان کلیدی: مدل سینتیکی، جذب و واجذب سطحی، نانوکامپوزیت بیوپلیمری، MOF، کئورستین.

۱– مقدمه

کئورستین بهعنوان یکی از قویترین آنتیاکسیدانهای طبیعی، به دلیل خواص ضدالتهابی و محافظت از سلولها در برابر آسیبهای اکسیداتیو، اهمیت زیادی در تغذیه و سلامت انسان دارد [۱]. با این حال، استخراج کارآمد این رنگدانه گیاهی به دلیل پیچیدگیهای ساختاری و هزینههای فرآیند، دغدغه برانگیز است [۲]. روشهای جذب سطحی بهعنوان یکی از راهکارهای مقرون به صرفه و موثر برای استخراج کئورستین به شمار می روند. ترکیبات فلزی-آلی (MOF) به همراه پلیمرهایی مانند صمغ عربی و پلی آنیلین با افزایش کارایی جذب و کاهش زمان واکنش، امکان ساخت نانوجاذب های مؤثر را فراهم می کنند [۳]. علاوه بر این، قابلیت استفاده مجدد از جاذبها، هزینه های کلی را کاهش داده و این روش را اقتصادی تر می سازد. در این پژوهش، نانوکامپوزیت مغناطیسی 204-NH2_AMS (MDF) موجادی به عنوان نانوجاذب سنتز شد تا سینتیک جذب و واجذب کئورستین روی سطح آن بررسی شود.

۲- روش آزمایش

در هر آزمایش، ۲۵ میلی گرم نانوکامپوزیت AG-g-PANI@MnFe₂O₄/UIO66-NH2 به ۱۰ میلی لیتر محلول کئورستین اضافه و در دمای ۲۹۸/۱۵ کلوین به مدت ۳۰۰ دقیقه همزده شد. سپس نانوکامپوزیت با آهنربا جدا و غلظت کئورستین باقی مانده با اسپکتروفتومتر UV-Vis اندازه گیری شد. برای ارزیابی قابلیت استفاده مجدد، نانوکامپوزیت اشباعشده از کئورستین با ۱۰ میلی لیتر اتانول تحت آزمایش واجذب قرار گرفت. سرعت واجذب طی ۵ دقیقه تا ۶ ساعت کنترل شد. مراحل جذب و واجذب تا ۵ دوره تکرار شد و کارایی نانوکامپوزیت اندازه گیری گردید. آزمایشات سه بار انجام و میانگین نتایج ارائه شد. معادلات سینتیکی شبه درجه اول و دوم، درصد جذب (۳%) و درصد واجذب (0%) کئورستین در زیر داده شده است [۴]:

$\ln(\mathbf{q}_{e}-\mathbf{q}_{t})=\ln\mathbf{q}_{e}-\mathbf{k}_{1}\mathbf{t}$	(1)
$\frac{t}{t} = \frac{1}{t} + \frac{1}{t} t$	(٢)
$q_t k_2 q_e^2 q_e^2$	

$$R\% = \frac{C_0 - C_e}{C_0} \times 100$$

$$D\% = \frac{A}{B} \times 100$$
(7)

در اینجا، $q_e q_e q_e q_e$ هر دو ظرفیت جذب ($mg.g^{-1}$) در زمان تعادل و در زمان t هستند. $k_1 e k_2 e_1$ به ترتیب ثابت سرعت واکنشهای شبه درجه اول و دوم است. $C_0 e_2 e_1$ به ترتیب غلظت اولیه و تعادلی کئورستین (میلیگرم بر لیتر) هستند. همچنین A مقدار کئورستین واجذب شده (میلیگرم) و B مقدار کئورستین جذب شده روی جاذب (میلیگرم) است.

۳- بحث و نتیجهگیری

۳-۱- آنالیزهای شناسایی جاذب

در شکل ۱-الف، وجود عناصر ۲۶ ، Mn و N در جاذب نشاندهنده سنتز موفق نانوکامپوزیت است. همچنین طبق اطلاعات نمودار BET، اندازه منافذ تعیینشده AG-g-PANI@MnFe2O4/UIO66-NH2، نانومتر بود که نشاندهنده وجود ساختار مزوپور است.



شكل۱: نمودار (الف) EDX (ب) BET نانوكامپوزيت

۲-۲- بررسی سینتیک جذب و واجذب

سینتیک جذب کئورستین روی نانوکامپوزیت AG-g-PANI@MnFe₂O₄/UIO66-NH2 مورد بررسی قرار گرفت و نتایج نشان داد که تعادل جذب در ۲۰۰ دقیقه حاصل شد. بر اساس تحلیل مدل های سینتیکی، مدل شبه مرتبه دوم با بالاترین ضریب همبستگی ۸۹۹۹۸ = R² بهترین برازش را نشان داد. واجذب کئورستین از سطح نانوکامپوزیت در حلال اتانول با راندمان واجذب ۸۵/۴۷ در ۶ ساعت مورد بررسی قرار گرفت و مدل شبه مرتبه دوم برازش بهتری را با ضریب همبستگی R² ۰/۸۷۹۵ = نشان داد.

R ²	ثابت سرعت (mg.g ⁻¹)	مدل	سينتيک	
۰/ ۸ ۸۴۰	$1/TT \times 1 \cdot -T$	شبه درجه اول		
•/٩٩٩٨	$1/\lambda\lambda \times 1 \cdot -7$	شبه درجه دوم	جدب	
•/٧۵٧۴	$P/\Lambda T \times 1 \cdot -F$	شبه درجه اول	واجذب	
٠/٨٧٩۵	$r/\gamma \lambda \times 1 \cdot r$	شبه درجه دوم		

جدول ۱: دادههای سینتیکی جذب و واجذب نانوکامپوزیت



شکل ۲: (الف) نمودار سینتیک جذب و واجذب، (ب) طیفهای UV-Vis جذب کئورستین و (ج) طیفهای UV-Vis واجذب کئورستین

۳-۳- قابلیت استفاده مجدد نانوکامپوزیت

قابلیت بازیابی نانوکامپوزیت از طریق پنج چرخه متوالی جذب و واجذب بررسی شد. در هر چرخه، نانوکامپوزیت پس از جذب کئورستین، با غوطهور شدن در اتانول و همزدن در دمای ۲۹۸/۱۵ کلوین، واجذب شد. نتایج نشان داد که پس از پنج چرخه، راندمان جذب از ۷۳/۷۴٪ به ۶۵/۳۲٪ کاهش یافت که نشاندهنده حفظ کارایی قابل توجه جاذب در چرخههای متعدد است.

منابع و مراجع

1. Ye, K., Xu, Sh., Zhou, Q., Wang, Zh. & Liu, Zh. (2023). Advances in Molecular Imprinting Technology for the Extraction and Detection of Quercetin in Plants. Polymers, 15, 2107.

2. Bitwell, Ch., Indara, S.S., Luke, Ch. & Kakoma, M.K. (**2023**). A review of modern and conventional extraction techniques and their applications for extracting phytochemicals from plants. Scientific African, 19, 01585.

3. Tajahmadi, S., Shamloo, A., Shojaei, A. & Sharifzadeh, M. (**2022**). Adsorption behavior of a gd-based metal– organic framework toward the quercetin drug: effect of the activation condition. ACS omega, 7, 41177-41188.

4. Hassanzadeh-Afruzi, F., Esmaeillzadeh, F., Heidari, G., Maleki, A. & Nazarzade Zare, E. (**2023**). Arabic gumgrafted-hydrolyzed polyacrylonitrile@ $ZnFe_2O_4$ as a magnetic adsorbent for remediation of levofloxacin antibiotic from aqueous solutions. ACS omega, 8, 6337-6348.



بررسی اثر اندازه حفرات کاتالیستهای میکرو و مزوپور تحت دما و زمانهای مختلف بر ایزومریزاسیون نرمال-هپتان

زينب جعفرى⁽، نسترن پارسافرد^{^{آو*}}

I -دانشجوی کارشناسی، شیمی کاربردی، گروه شیمی کاربردی، دانشکده علوم پایه و فنی مهندسی و دانشگاه کوثر، Email: : dastmoozehn@yahoo.com ^{۲ و *}- دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی کاربردی، دانشکده علوم پایه و فنی مهندسی و دانشگاه کوثر، Email:nparsafard@kub.a.ir

واژگان کلیدی: حفرات، کاتالیست، میکرو و مزوپور، ایزومریزاسیون نرمال-هپتان.

۱– مقدمه

ایزومریزاسیون n-هپتان به عنوان یکی از فرآیندهای مهم در صنایع پتروشیمی و تبدیل نفت، موضوع تحقیقاتی متعددی در زمینه کاتالیستها و فرآیندهای کاتالیستی است. در این فرآیند، n-هپتان به صورت ایزومره شده و ترکیبات مختلفی از آن تولید می شود که کاربردهای متنوعی دارند [۱]. کاتالیستهای میکروپور و مزوپور دو نوع کاتالیست مهم هستند که در فرآیندهای كاتاليستى استفاده مىشوند. اندازه حفرات اين كاتاليستها مىتواند بر عملكرد كاتاليستي آنها تأثير قابل توجهي داشته باشد. پژوهشگران در سال ۲۰۲۰ به بررسی کاتالیستهای پشتیبانی شده توسط Pt با حفرات میکرو و مزویور در فرآیند ایزومریزاسیون n-هپتان پرداختند. این محققان روشهای سنتزی مختلفی برای تهیه این کاتالیستها معرفی کردند و ویژگیهای آنها را با استفاده از تکنیکهای طیفسنجی و میکروسکوپی مختلف بررسی نمودند. این بررسیهای کاتالیستی نشان دادند که کاتالیستهای مزوپور نسبت به کاتالیستهای میکروپور عملکرد بهتری در ایزومریزاسیون n–هپتان دارند. این بهبود عملکرد به دلیل بزرگتر بودن حفرات مزوپور و امکان عبور مولکولهای بزرگتر گزارش شده است [۲]. نتایج همچنین نشان دادند که غلظت Pt اندازه حفرات کاتالیستها بر عملکرد کاتالیستی تأثیر قابل توجهی دارند. بهترین عملکرد در کاتالیستهایی با غلظت Pt بالا و حفرات مزوپور مشاهده شد. HY یک زئولیت میکروپور است که حفرات بسیار کوچک دارد. این کاتالیست معمولاً برای ایزومریزاسیون هپتان در دماهایی بین ۲۰۰ تا ۳۵۰ درجه سلسیوس استفاده می شود. کاتالیست Pt/HY عملکرد متوسط در ایزومریزاسیون هپتان دارد. این کاتالیست به دلیل حفرات کوچک، امکان عبور مولکولهای بزرگتر را محدود می کند. در حالیکه کاتالیست MCM-48 یک ساختار مزوپور است که حفرات بزرگتر از HY دارد. این کاتالیست نیز برای ایزومریزاسیون هپتان در دماهایی بین ۲۰۰ تا ۳۵۰ درجه سلسیوس استفاده می شود [۳]. دراین مقاله، ما به بررسی اثر اندازه حفرات کاتالیستهای ميكروپور (Pt/HY) و مزوپور (Pt/MCM-48) تحت شرايط دمايي و زماني مختلف بر ايزومريزاسيون نرمال-هپتان مي پردازيم.



۲-نتایج و بحث

نتایج حاصل از این بررسی (شکل ۱) نشان میدهد که کاتالیست 48-Pt/MCM عملکرد بهتری نسبت به Pt/HY در ایزومریزاسیون هپتان دارد. این بهبود عملکرد به دلیل بزرگتر بودن حفرات مزوپور و امکان عبور مولکولهای بزرگتر است. کاتالیست 48-Pt/MCM به تولید ترکیبات چند شاخهای و هیدروکربنهای آروماتیک کمک میکند. عملکرد این کاتالیست باعث افزایش عدد اکتان خواهد شد. این مقایسه نشان میدهد که کاتالیست 48-Pt/MCM نسبت به Pt/HY عملکرد بهتری در ایزومریزاسیون هپتان دارد، هرچند ترکیب آنها میتواند به طراحی کاتالیستهای کارآمدتری کمک کند. بر اساس نتایج حاصل از این تحقیق، میتوانیم چند نکته کلیدی را به دست آوردهایم. کاتالیستهای کارآمدتری کمک کند. بر اساس نتایج عملکرد بهتری در ایزومریزاسیون نرمال–هپتان نشان دادند. این بهبود عملکرد به دلیل بزرگتر بودن حفرات مزوپور و امکان عبور ایزومریزاسیون کاهش خواهد یافت. این رفتار نشان میدهد که در دماهای بالاتر، واکنش پذیری نسبت به کاتالیستهای میکروپور ایزومریزاسیون کاهش خواهد یافت. این رفتار نشان میدهد که در دماهای بالاتر، واکنش به سمت تولید محصولات دیگری کاهش خواهد یافت. این رفتار نشان می دهد که در طولانی میابد، اما گزینش پذیری نسبت به محصولات دیگری مولکولهای بزرگتر است. با افزایش دما، سرعت ایزومریزاسیون افزایش مییابد، اما گزینش پذیری نسبت به محصولات دیگری مولکولهای بزرگتر است. با فزایش دمان می دهد که در طولانی می میابد، اما گزینش پذیری نسبت به محصولات دیگری میترفت میکند. با افزایش زمان واکنش، درصد تبدیل افزایش مییابد، اما گزینش پذیری نسبت به محصولات ایزومریزاسیون کاهش خواهد یافت. این رفتار نشان می دهد که در طولانی شدن زمان واکنش، کاتالیستها به سمت غیرفعال شدن پیشرفت میکنند. کاتالیستهای مزوپور نسبت به کاتالیستهای میکروپور گزینش پذیری بیشتری در تولید محصولات ایزومریزاسیون می کنند. کاتالیستهای مزوپور نسبت به کاتالیستهای میکروپور گزینش پذیری بیشتری در تولید محصولات ایزومریزاسیون می توانند در شرایط دمایی و زمان مراسب برای تولید بزین با عدد اکن بالا یا ترکیبات چانشاده شوند. انتخاب دما و زمان واکنش بر اساس نیازهای خاص صنعت، مانند تولید بنزین با عدد اکن بالا یا ترکیبات چندشاخهای، میتواند ایما شود.



شکل ۱: اثر دما و زمان بر ایزومریزاسیون n–هپتان توسط کاتالیستهای Pt/HY و Pt/MCM-48.

۳-نتيجهگيرى

این مطالعه نشان میدهد که اندازه حفرات، دما و زمان واکنش بر عملکرد کاتالیستی کاتالیستهای میکروپور و مزوپور در فرآیند ایزومریزاسیون نرمال-هپتان تأثیر قابل توجهی دارند. بنابراین، انتخاب مناسب کاتالیست و تنظیم شرایط واکنش بر اساس نیازهای خاص صنعت میتواند به طراحی کاتالیستهای کارآمدتر کمک کند.



منابع و مراجع

[1] Cui, Y., Suo, Y., Zhang, W., Wang, Y., Nie, C., & Wang, Y. (2023). Preparation of Pd/Ce (F)-MCM-48 catalysts and their catalytic performance of n-heptane isomerization. Green Processing and Synthesis, 12(1), 20230066.

[2] Ghaderi, Z., Peyrovi, M. H., & Parsafard, N. (2022). Pt supported micro-mesoporous catalysts: synthesis, characterization and catalytic evaluation in n-heptane isomerization. Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis, 135(6), 3099-3111.

[3] Parsafard, N. (2022). The Effect of Zeolites on the Catalytic Performance of Pt/(13X, HY & HZSM-5)-HMS Micro/Mesoporous Composites in the Selective Isomerization Process of Normal Heptane. Nashrieh Shimi va Mohandesi Shimi Iran, 41(1), 49-60.

بررسی پایداری آنزیم لیپاز تثبیتشده بر روی غشای بسپاری اصلاحشده با نانوصفحههای

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

فرانک جعفریان'، عبدالخالق بردبار

۱ - دانش آموخته دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، رایانامه: faranak.jafarian@gmail.com ۲ - استاد، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، رایانامه: akbordbar@gmail.com

واژگان كليدى: تثبيت أنزيم، ليپاز كانديدا روگوسا، پايدارى، نانوصفحەهاى گرافن اكسيد، واكنشگاه غشايي تركيبي أنزيم

۱– مقدمه

لیپازها یکی از پرکاربردترین آنزیمهای محلول در آب از گروه هیدرولازها هستند که آبکافت پیوند استری را در تری آسیل گلیسرولها برای تولید دی گلیسیرید، مونوگلیسیرید، اسید چرب و گلیسرول کاتالیز می کنند. آنزیم لیپاز از کاندیدا روگوسا به دلیل فعالیت بالا و قیمت مناسب آن نسبت به بقیه منابع آنزیم لیپاز از توجه ویژهای برخوردار است و در صنایع مختلفی همچون مواد غذایی، لوازمآرایشی و بهداشتی، سوختهای زیستی و مواد شوینده و داروسازی مورد استفاده قرار می گیرد (ریبیرو، ۲۰۱۱). از سوی دیگر، هزینههای بالای تولید و کاهش فعالیت آن در برابر مخلوط واکنش از مهمترین محدودیتهای کاربرد آن در صنعت است. اغلب تثبیت آنزیم بر روی یک بستر مناسب میتواند سبب جداسازی آسان آنزیم از مخلوط واکنش، کاهش آلودگی آنزیم در فرآورده (ها) و افزایش تولید مواد با درصد خلوص بالاتر، استفاده مجدد از آنزیم، افزایش سطح تماس آنزیم با مواد سخت دما و HT شود (محمد، ۲۰۱۵). ازاینرو برای ساختار سهبعدی آنزیم و جلوگیری از غیرفعال شدن آنزیم در شرایط محیطی ترکیبی با نانوصفحههای گرافن اکسید به عنوان بستری برای تثنیم و جلوگیری از غیرفعال شدن آنزیم در شرایط محیطی زیرکیبی با نانوصفحهای گرافن اکسید به عنوان بستری برای تثنیم و جلوگیری از غیرفعال شدن آنزیم در شرایط محیطی ترکیبی با نانوصفحههای گرافن اکسید به عنوان بستری برای تثبیت آنزیم لیپاز از کاندیدا روگوسا استفاده گردیده است. شایان سخت دما و PH شود (محمد، ۲۰۱۵). ازاینرو برای بهینهسازی کار کرد عملیاتی این آنزیم، در این پژوهش، از غشای بسپاری ترکیبی با نانوصفحههای گرافن اکسید به عنوان بستری برای تثبیت آنزیم لیپاز از کاندیدا روگوسا استفاده گردیده است. شایان گرافناکسید، پلی اتر سولفون، لیپاز کاندیدا روگوسا، واکنشگاه غشایی ترکیبی آنزیم، پارانیترو فنیل پالمیتات و پارانیترو فنول استفاده شده است.

۲- روش کار

PES در این پژوهش، غشاهای ترکیبی از آمیختن درصدهای مختلف GON سنتز شده به روش اصلاح شده ی هامر، با محلول PES و از طریق روش وارونگی فاز تهیه و برای تثبیت CRL مورد استفاده قرار گرفت. ترکیب شیمیایی، مورفولوژی سطح و عملکرد غشای ترکیبی و HMR از طریق روش های مختلف همچون ATR-IR، XRD ، ATR-IR، اندازه گیری زاویه تماس، انرژی آزاد سطح، شار عبوری آب خالص و شار عبوری P-NP حاصل از واکنش آبکافت P-NPP در حضور آنزیم لیپاز بررسی شدند. برای دستیابی به واکنشگاه غشایی ترکیبی آنزیمی کارا، درصد GON در غشای ترکیبی، مقدار اولیه آنزیم، زمان تثبیت و شرایط نگهداری EHMR بهینه گردیدند. پس از آن قابلیت استفاده مجدد، پایداری pH و حرارتی EHMR مورد بررسی قرار گرفت.

14.5. 19. 19. 17. 11. 1. 1. 11.

۳- بحث

در شکل ۱- الف قابلیت استفاده مجدد از EHMR، در پنج چرخه نشان داده شده است. چنانچه ملاحظه می شود، بعد از پنج بار استفاده مجدد، فعالیت باقیمانده نسبی آنزیم تثبیت شده /۲۵/۰۲ است. این موضوع می واند به مناسب بودن محیط غشا برای فعالیت آنزیم و رهایش کمتر آنزیم از این بستر نسبت داده شود. در شکل ۱- ب، نتایج حاصل از بررسی پایداری حرارتی EHMR و آنزیم آزاد در محدوده دمایی ۳۰ تا ۶۰ درجهی سانتی گراد آورده شده است. همان طور که مشاهده می شود، فعالیت آنزیم آزاد با افزایش دمای شوک، با سرعت کاهش مییابد. درحالیکه، برای آنزیم تثبیتشده، میزان کاهش فعالیت بهمراتب کمتر بوده و حتی در محدوده ۳۰ تا ۴۰ درجهی سانتی گراد، کاهشی مشاهده نمی گردد. بهطوری که در شوک دمای ۷۰ درجه سانتی گراد، ۴۳/۵۴ درصد از بیشینه فعالیت خود را حفظ کردهاند. درحالی که، آنزیم آزاد فعالیت خود را بهطور کامل ازدست داده است. به نظر میرسد که برهمکنشهای CRL با غشا اثر حفاظتی بیشتری بر روی ساختار سهبعدی CRL داشته و مقاومت آن را در برابر شوک حرارتی افزایش داده است. همانطور که در شکل ۱– پ دیده می شود، بهمنظور مقایسه، نتایج حاصل از بررسی پایداری در برابر تغییر pH ، آنزیم آزاد و EHMR در گستره pH از ۴ تا ۱۰ آورده شده است. بیشینه باقیمانده فعالیت برای آنزیم آزاد و EHMR در pH = ۷ مشاهده گردید. با وجود آن که پایداری آنزیم آزاد در گستره pH اسیدی ۴ تا ۵/۵ بیشتر است، اما در pH بالاتر از ۷، پایداری آن به شدت کاهش می یابد. به طوری که، بعد از اعمال شوک در pH=۱۰، باقیمانده فعالیت آن به ۱۴/۳۷ درصد مقدار بیشینه فعالیت میرسد. با بررسی در کل محدوده pH، درمجموع میتوان ادعا نمود که عملکرد غشا ترکیبی بهتر بوده و سبب پایداری بیشتری در آنزیم تثبیتشده گردیده است. ازآنجایی که پایداری در مقابل شوک pH، به میزان برگشتپذیری ساختار CRL در اثر تغییر حالت یونیزاسیون گروههای یونیزهشونده آنزیم برمی گردد، می توان این گونه نتیجهگیری کرد که برهمکنش غشا و آنزیم به نحو مؤثر تری ساختار سهبعدی آنزیم را از تغییرات القائی حاصل از تغییر pH، حفظ نموده است.



شکل ۱- الف- قابلیت استفاده مجدد از EHMR-ب- مقایسه پایداری حرارتی آنزیم آزاد CRL و EHMR -پ-مقایسه پایداری آنزیم آزاد CRL و EHMR در برابر تغییر pH.



۵- نتیجهگیری

در این مطالعه، غشاهای ترکیبی حاوی درصدهای وزنی مختلف از نانو صفحات گرافن اکسید تهیه و مشخصهیابی شدند. مشخصهیابی این غشاها از طریق روشهای مختلف، بهبود ویژگیهایی مثل افزایش آب دوستی سطح، افزایش زبری سطح، افزایش انرژی آزاد سطح و افزایش شار آب خالص را نشان داد. در ادامه درصد نانو صفحههای گرافن اکسید در غشای ترکیبی، مقدار اولیه آنزیم، زمان تثبیت و بالاخره شرایط نگهداری واکنشگاه غشای ترکیبی آنزیمی بهینه گردیدند. نتایج بررسی قابلیت استفاده مجدد و پایداری در مقابل شوک PH و دما نشاندهنده آن است که این غشای ترکیبی میتواند بستر مناسبی برای تثبیت آنزیم باشد.

منابع و مراجع

[1] Ribeiro, B.D., et al., (2011). Production and use of lipases in bioenergy: a review from the feedstocks to biodiesel production. Enzyme research, 2011:615803.

[2] Mohamad, N.R., et al. (2015). An overview of technologies for immobilization of enzymes and surface analysis techniques for immobilized enzymes. Biotechnology & Biotechnological Equipment, 29(2): 205-220.



اثر میدان الکتریکی بر انتقال گرمای آب محدود شده بین دو صفحه نیترید بور

سارا جهان آبادی' ، محمد کمالوند'

۱ – دانشجو دکتری، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی –دانشگاه یزد sa.jahan.abadii@gmail.com ۲- نویسنده مسئول : دانشیار ، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی – دانشگاه یزد kamalvand@yazd.ac.ir

واژگان کلیدی: انتقال گرما، آب محدود شده، نیترید بور، میدان الکتریکی، شبیهسازی دینامیک مولکولی، لمپس

۱–مقدمه

امروزه نانوساختارها کاربردهای بسیار زیادی در زمینههای مختلف همچون بهبود رفتار حرارتی [۱] مواد دارند. از مهم ترین کاربردهای نانوساختارها می توان به انتقال جرم (شامل جابجایی اتمها/ مولکولها) و انتقال گرما توسط آنها اشاره کرد. در بین گونههای مختلف نانوساختارها، نانوصفحات حرارت را با بیشترین بازده انتقال می دهند [۲]. از سوی دیگر نانو صفحات نیترید بور از مناسب ترین مواد در زمینه انتقال گرما و جرم به شمار می وند که دارای پایداری شیمیایی و فیزیکی هستند [۳]. در ترمودینامیک، سیال انتقال گرما گاز یا مایعی است که به عنوان واسطه در سرمایش و گرمایش در فرآیندهای انتقال گرما نقش ایفا می کند. آب از پر کاربردترین سیالهای انتقال گرما به شمار می ود. از همین رو به بررسی انتقال گرمای آب محدود شده بین نانوصفحات نیترید بور در حضور میدان الکتریکی اعمال شده در راستای عمودی Z پرداخته می شود.

۲-روش پژوهش

در این پژوهش، از نرمافزار LAMMPS که یکی از نرمافزارهای محاسباتی مبتنی بر شبیه سازی دینامیک مولکولی است، استفاده شده است. همچنین، برای بررسی برهمکنش بین مولکول های آب از مدل SPC/E [۶] استفاده شد. محاسبه ضریب انتقال گرما با روش گرین-کوبو [۴٫۵] انجام شد. ضریب انتقال گرما دارای سه مولفه است که شامل مولفه های افقی x و y (تقریبا با یکدیگر برابرند و به صورت میانگین گزارش میشود) و مولفه عمودی z میباشد. در این پژوهش دما 300 K و ابعاد جعبه شبیه سازی A(Z) (نازی از D(Z) می باشد، که مقدار H (فاصله دو صفحه نیترید بور بالایی و پایینی) از σ تا 100 (σ قطر اتم اکسیژن) متغیر می باشد. میدان الکتریکی اعمال شده در راستای عمودی z از 0 تا $\frac{V}{A}$ (در جهت عمودی z) است.



۳-بحث و نتیجهگیری

در شکل ۱ میانگین مولفه های افقی ضریب انتقال گرما بر حسب میدان الکتریکی نمایش داده شده است. روند کاهشی ضریب انتقال گرما برای 60 H گرما برحسب افزایش میدان الکتریکی کاملا واضح است. بنابراین، میتوان ادعا کرد که با افزایش میدان الکتریکی در راستای عمود بر دیوارهها، ضریب انتقال گرما در راستای موازی با دیوارهها کاهش مییابد. با توجه به ساختار جامدگونه سیال محدود شده، احتمال میرود دلیل کاهش ضریب انتقال گرما در راستای موازی با دیوارهها کاهش مییابد. با توجه به ساختار جامدگونه سیال محدود شده، احتمال میرود دلیل کاهش ضریب انتقال گرما در راستای موازی با دیوارهها کاهش مییابد. با توجه به ساختار جامدگونه سیال محدود شده، احتمال میرود دلیل کاهش ضریب انتقال گرما با افزایش میدان الکتریکی، کاهش جنب و جوش مولکولها باشد. برای H های کوچکتر نمیتوان روند واضحی را پیدا کرد و با توجه به اثرات شدید محدودیت بر سیال، احتمال میرود که با انتقال گرما با افزایش میدان الکتریکی، کاهش جنب و موش مولکولها باشد. برای H های کوچکتر نمیتوان روند واضحی را پیدا کرد و با توجه به اثرات شدید محدودیت بر سیال، احتمال میرود که با انتقال قرما با افزایش میدان الکتریکی، کاهش جنب و موش مولکول ها باشد. برای H های کوچکتر نمیتوان روند واضحی را پیدا کرد و با توجه به اثرات شدید محدودیت بر سیال، احتمال میرود که در این سامانه ای از انتقال فاز شده باشد. نکته دیگری که باید به آن توجه کرد، افزایش مقدار ضریب انتقال گرما با افزایش فاصله دو صفحه است که در شکل ها به خوبی پیداست.



شایان ذکر است که برای مولفه عمودی ضریب انتقال گرما بر حسب میدان الکتریکی هیچ روند مشخصی مشاهده نشد و اختلاف ضریب انتقال گرما در سامانههای مختلف در حد خطای محاسبات و درنتیجه قابل چشمپوشی است. دلیل این عدم وابستگی را میتوان به تغییرات اندک ساختار لایهای سیال محدود شده در میدانهای مختلف نسبت داد.



منابع و مراجع

- [1] Drexler, E. "Engines of creation: The coming era of nanotechnology"; Anchor, 1987.
- [2] Saini, R.; Saini, S.; Sharma, S. Journal of cutaneous and aesthetic surgery 2010, 3, 32.
- [3] Belkin, A.; Hubler, A.; Bezryadin, A. Scientific reports 2015, 5, 8323.
- [4] Green, M. S. The Journal of chemical physics 1954, 22, 398.
- [5] Kubo, R. Journal of the physical society of Japan 1957, 12, 570.
- [6] Achari, P. F.; Bejagam, K. K.; Singh, S.; Deshmukh, S. A. Computational Materials Science 2019, 161, 339.



پایداری نوری و خواص فوتوفیزیکی سامانهی آلی بر پایه کلکون

رومینا چگینی، رضا امیدیان

دانشکده شیمی- دانشگاه اصفهان- اصفهان- ایران r.omidyan@sci.ui.ac.ir

واژگان کلیدی: پایداری نوری، آسایش غیرتابشی، سطوح انرژی پتانسیل، روشهای از اساس.

۱– مقدمه

جهت پیشگیری از اثرات مخرب تابش فرابنفش، امروزه سعی بر آن است تا در ساحت مواد ضدآفتاب، از ترکیبات طبیعی مختلف استفاده شود. هیدروکسی کلکونها گروهی از ترکیبات کلکون هستند که پیش ساز فلاونوئیدها میباشند. این ترکیبات میتوانند به عنوان ضدآفتاب عمل کنند زیرا دارای کروموفور هستند که میتوانند تابش فرابنفش A (۴۰۰-۳۱۵ نانومتر) و B (۲۸۰-۳۱۵ نانومتر) را جذب کنند. بنابراین، سامانههای کلکون میتوانند در بحث پایداری نوری گزینههای مناسبی به شمار آیند. لازم به ذکر است تاکنون برخی از مطالعات آزمایشگاهی قابلیت استفاده ترکیبات کلکون در سامانههای ضدآفتاب را پیشنهاد نموده است، اما تاکنون مطالعه جامعی در خصوص سازوکار آسایش و چگونگی محافظت این سامانهها در مقابل نور صورت نگرفته است. لذا، در این پژوهش بررسی دقیق ساختارهای هندسی، الکترونی و رفتار فوتوفیزیکی این سامانهها و چگونگی عملکرد محافظتی آنها در حضور تابش فرابنفش مطالعه میشود (وو، ۲۰۲۱ و امیدیان، ۲۰۱۶).

۲- روش

این پژوهش دارای ماهیت نظری و محاسباتی است. ابتدا ساختارهای در نظر گرفته شده در حالت پایه با استفاده از روش MP2 به بینهسازی شدهاند. سپس مطالعه ی حالتهای تحریک شده با استفاده از روشهای (2)ADC و CASPT2 انجام شده-است. مطالعه منحنی های انرژی پتانسیل به کمک روشهای LIIC (ترکیب خطی از مختصات درونی) با روشهای از اساس انجام شده است. همچنین هندسه بهینه تلاقی های مخروطی به کمک روش فضای فعال میدان خودساز گار CASSCF مطالعه شده است. جهت انجام این پژوهش از نرم افزارهای توربومول و گوسین استفاده شده است.

۳- بحث و نتیجه گیری

الف) ساختار هندسی مولکول در حالت پایه و انرژیهای انتقال عمودی

محاسبات MP2/cc-pVDZ بر روی دو کانفورمر سیس و ترانس سامانه ۲۰-هیدروکسیکلکون نشان داد که شکل ترانس آن به میزان ۱۰/۲۱ الکترونولت پایدارتر از شکل سیس میباشد. طول موج بیشینه جذب این سامانه ۳۲۰ نانومتر میباشد که با نتایج تجربی انطباق خوبی نشان میدهد (تشیما، ۲۰۰۹). از دیدگاه نظری این سامانه دارای یک جذب قوی در ناحیه فرابنفش میباشد که مربوط به انتقال الکترونی S₂-S₀ است. از نتایج حاصل از محاسبه RI-CC2 مشخص شد که بیشتر سهم انتقالات الکترونی S₂-S₀ مربوط به انتقال الکترونی HOMO-LUMO (با مشارکت نزدیک به ۸۰ درصد) میباشد. همچنین مشخص شد که انتقال S₁-S₀ مربوط به HOMO-5-LUMO میباشد. تنها اولین انتقال الکترونی S₁-S₀، دارای ماهیت $\pi\pi$ است و سایر انتقالات دارای ماهیت $\pi\pi$ میباشند.

14.5.111.17.979.11

ب) منحنیهای انرژی پتانسیل

منحنی انرژی پتانسیل در راستای انتقال اتم هیدروژن درگیر در پیوند هیدروژنی درونمولکولی در سطح محاسباتی (C2) MP2/ADC به ترتیب برای سطوح S_0 و S_1 بر روی هندسههای بهینهشده آنها حاصل شده است. برای هر نقطه منحنی انرژی پتانسیل، تنها طول پیوند H–O به عنوان مختصه واکنش ثابت نگه داشته شده است و تمامی سنجههای دیگر آزادانه بهینه شدهاند. به منظور تخمین ماهیت منحنی انرژی پتانسیل، تنها طول پیوند H–O به عنوان مختصه واکنش ثابت نگه داشته شده است و تمامی سنجههای دیگر آزادانه بهینه شده اند و تمامی سنجههای دیگر آزادانه بهینه شده اند و تمامی سنجههای دیگر آزادانه بهینه شدهاند. به منظور تخمین ماهیت منحنی انرژی پتانسیل چرخش مولکول با توجه به چرخش حلقه، انرژیهای S0 و S1 را یا در راستای زاویه دو وجهی S1–C2–C8–C2–C8 معیین شدهاند. نتایج در شکل ۱ قابل مشاهده است. این منحنی به تلاقی مخروطی حاصل از برخورد منحنیهای S1⁽³⁾ و S⁽³⁾ حتم میشود. سامانه در نقطه تلاقی مخروطی در سطح محاسباتی مخروطی حاصل از برماوزار گوسین بهینه سازی شد که در شکل ۱ قابل مشاهده است.



شکل ۱: نمودارهای انرژی پتانسیل

۴- نتیجهگیری

در این مطالعه ساختار هندسی و انتقالات الکترونی سامانه آلی ۲-هیدروکسی کلکون مطالعه و بررسی شد. از استخراج منحنی های انرژی پتانسیل مشخص می گرددکه سامانه مذکور بسیار مستعد انتقال پروتون در حالت الکترونی تحریک شده است. پس از این فرایند چرخش بخش دوم سامانه منجر به پیدایش تلاقی در سطوح انرژی پتانسیل می گردد که آسایش فوق سریع سامانه را از طریق تبدیل درونی بر عهده دارد. با توجه به نتایج این پژوهش پیش بینی می شود ۲-هیدروکسی کلکون از طول عمر

بسیار کوتاه در حالت تحریک شده برخواردارباشد و این به معنی پایداری نوری و قابلیت این سامانه جهت استفاده در ترکیبات ضد آفتاب می باشد.

منابع و مراجع

[1] Omidyan, R., & Iravani, M. (**2016**). Excited State Proton Transfer and Deactivation Mechanism of 2-(4'-Amino-2'-hydroxyphenyl)-1 H-imidazo-[4, 5-c] pyridine and Its Analogues: A Theoretical Study. J Phys Chem A. , 120(7), 1012-1019.

[2] Teshima, T., Takeishi, M., & Arai, T. (**2009**). Red fluorescence from tautomers of 2'-hydroxychalcones induced by intramolecular hydrogen atom transfer. New Journal of Chemistry, 33(6), 1393-1401.

[3] Wu, Z., Wang, M., Guo, Y., Ji, F., Wang, C., Wang, S., Zhang, J., Wang, Y., Zhang, S., & Jin, B. (2021). Nonadiabatic dynamics mechanism of chalcone analogue sunscreen FPPO-HBr: excited state intramolecular proton transfer followed by conformation twisting. J Phys Chem B., 125(33), 9572-9578.



تاثیر تغییرنقص روی ظرفیت کوانتومی الکترود پایه سیلیسنی در عملکرد ابرخازنها

زهرا حسن زاده تازه قشلاق*'، جواد بهشتيان' ، سكينه منصورى'

۱ و *- نویسنده مسئول: هیئت علمی وابسته، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی ، دانشکده علوم پایه و دانشگاه آزاد واحد تهران مرکزی Hasanzadeh.206z@yahoo.com ۲- دانشیار ، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی J.beheshtian@Sru.ac.ir ۳- استادیار، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی ، دانشکده علوم پایه و دانشگاه آزاد واحد تهران مرکزی sak.mansouri@jauctb.ac.ir

واژگان كليدى: ابرخازنھا، سيليسن، ظرفيت كوانتومى، نقص.

۱– مقدمه

دلایلی چون کاهش دسترسی به سوختهای فسیلی، رشد جمعیت و مصرف بیش از پیش انرژی محققین را به سمت منابع تجدید پذیر و پایدار سوق میدهد. امروزه یکی از چالشهای مهم در جهان توسعه انرژی الکتریکی و سیستمهای ذخیرهسازی مانند باتریهای قابل شارژ و خازنهای الکتروشیمیایی با قدرت بالا میباشد. یکی از روشهای ذخیرهسازی، استفاده از ابرخازن-های الکتروشیمیایی میباشد. مزیتهای اصلی ابرخازنها را می توان تعداد دفعات شارژ و دشارژ، ظرفیت ذخیرهسازی بالای انرژی و طول عمر بالا دانست. عامل محدود کننده در ابرخازنها ظرفیت کوانتومی میباشد، که بهدلیل کمبود چگالی حالتها در نزدیکی سطح فرمی ایجاد میشود [۳–۱]. هدف از انجام این تحقیق، بهینه سازی و کاربرد سیلیسن نقصدار بهعنوان الکترود در ابر خازنها به منظور بهبود عملکرد وسایل ذخیره انرژی میباشد.

۲- روش محاسباتی

محاسبات نظریهٔ تابعی چگالی با استفاده از نرم افزار وسپ انجام شد. برای انرژی تبادلی همبستگی تابعیت چگالی از تقریب گرادیان عمومی استفاده شد. روش مونخورست پک با مش نقاط کا [۴] (۱×۴×۴)، سوپر سل (۲×۲)، (با۷۲ اتم سیلیکون در صفحه اولیه و بدون نقص) استفاده شد. برای جلوگیری از برهمکنش بین تصویرهای متوالی فاصله بین صفحه ها ۶۰ آنگستروم تنظیم شد.

۳- بحث و نتیجه گیری

در این مقاله، با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی ویژگی های سیلیسن نقصدار (نقص تک حفرهای تا نقص شش حفرهای) در شکل (۱) به عنوان ماده الکترودی در ابرخازنها مورد بررسی قرار گرفت. کوانتومی انتگرالی به ازای واحد وزن برای سیلیسن اولیه و سیلیسن با نقص ساختاری در ولتاژ۱.۵ + تا ۱.۵- ولت در شکل (۲) نشان داده شده است. بر طبق نتایج به دست آمده، همه ساختارها عملکرد مناسبی در پتانسیل مشخص دارند. در مقایسه با سیلیسن اولیه، همه ساختارهای سیلیسن نقص دار رفتار نامتقارن دارند، اما در محدوده مشخصی، آنها به طور برجسته ای نسبت به سیلیسن اولیه در پتانسیل های مثبت و منفی افزایش داشته اند.

14. 7. 111. 7. 19







منابع و مراجع

[1] Liu Y, Qiao Y, Zhang W, Li Z, Ji X, Miao L, Yuan L, Hu X, Huang Y. (2015). Sodium storage in Na-rich Na_xFeFe (CN)₆ nanocubes, Nano Energy 12, 386-393.

[2] Cheng Long, Ling Miao, Dazhang Zhu, Hui Duan, Yaokang Lv, Liangchun Li, Mingxian Liu, Lihua Gan. (2021). Adapting Kinetics-Enhanced Carbon Nanostructure to Li/Na Hybrid Water-in-Salt Electrolyte for High-Energy Aqueous Supercapacitors, ACS Appl. Energy Mater, 4, 5727-5737.

[3] Ziyang Song Ling Miao, Liangchun Li, Dazhang Zhu, Lihua Gan, Mingxian Liu. (2021). A robust strategy of solvent choice to synthesize optimal nanostructured carbon for efficient energy storage, Carbon, 180,135-145.
[4] Pak AJ, Paek E, Hwang GS. (2014). Tailoring the performance of graphene-based supercapacitors using topological defects: A theoretical assessment, Carbon 68,734-741.



زهرا حسن زاده تازه قشلاق

هیئت علمی وابسته، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی ، دانشکده علوم پایه و دانشگاه آزاد واحد تهران مرکزی Hasanzadeh.206z@yahoo.com

واژگان كليدى: گلايسين، مدل پيوستار قطبش پذير رسانا و مدل پيوستار قطبش پذير فرمول معادله انتگرال

۱–مقدمه

اسیدهای آمینه یکی از مهم ترین اجزای بدن انسان هستند و ترکیبات آنها در ترکیبات زیست شناسی، صنعت، داروسازی و آزمایشگاه استفاده می شود. دانستن ساختار این نوع مواد در محلول در مکانیسم واکنشها بسیار مهم است. در پروتونه، سه گونهی متفاوت ایجاد میشود که در ساختار و طیف های فرابنفش و مادون قرمز تفاوت اساسی دارند. در این مطالعه از روش های محاسباتی برای مقایسه مقادیر ترمودینامیکی حاوی انرژی آزاد گیبس و ثابت تعادل ترمودینامیکی برای سه گونه مختلف گلایسین استفاده شده است. محاسبات ما در فاز محلول با مدل پیوستارقطبش پذیر رسانا و مدل پیوستار قطبش پذیر فرمول معادله انتگرال انجام شد [۳–۱]

۲-روش محاسباتی

محاسبات با استفاده از نرم افزار گوسین انجام شد. بدین منظور ابتدا ساختار سه گونه مختلف گلایسین با استفاده از نرم افزار کم آفیس طراحی و بهینه سازی اولیه با استفاده از نرم افزار کم بیو و بر روی کامپیوتر با پردازنده ۲.۲۰ گیگاهر تز برای نهایی سازی مورد استفاده قرار گرفت. محاسبات نهایی با روشهای اختلال مولر پلست (MP2) و برهم کنش آرایشی دو تایی (CISD) و مجموعه پایه های مختلف در فاز محلول با مدل های پیوستار قطبش پذیر رسانا (CPCM) و پیوستار قطبش پذیر فرمول معادله انتگرال (IEFPCM) انجام شد [۴،۵].

۳-بحث و نتیجه گیری

برای بررسی اثر محلول فازی با مدلهای CPCM و IEFPCM برای گلایسین (شکل (۱)) و گونه های مختلف آن بهینهسازی انجام شد. سپس محاسبه مقادیر ترمودینامیکی حاوی ثابت ترمودینامیکی (pK) و انرژی آزاد گیبس (ΔG) برای سه گونه مختلف گلایسین انجام شد. با بررسی نتایج بدست آمده از شکلهای (۲و ۳) و جداول (۱ و ۲)، ما دریافتیم که pK و ΔG با مدل CPCM کاملاً مشابه مدل IEFPCM میباشد.





جدول ۱: مقادیر pK و GG با روشهای MP2 و CISD برای معادله مورد نظر در فاز محلول با مدلهای CPCM و IEFPCM و IEFPCM

Method		СРСМ		IEFPCM	
		ΔG (KJ/mol)	pk	ΔG (KJ/mol)	pk
	6-311G	١۶۴٬۶۸۷۱	۰,۱۲۰۷	184,1.89	۰,۱۲۰۸
MP ₂	6-311G**	140,4110	•,\YXY	۱۷۴٬۵۹۵۸	• ، ۱۲۸۰
	CC-PVTZ	189,7018	•,1744	١۶٩,۶٣٨۴	•,1744
CISD	6-311G	۲۵۲٬۶۵۷۹	۰,۱۸۵۲	۱۶۷٫۷۵۵۹	•,1٢٣٠
	6-311G**	۱۷۷٬۹۲۱۵	•,1٣•۴	۱۷۷٫۷۹۶۰	•,1٣•٣

منابع و مراجع

[1] Shaymaa H. Abdulrahmana, Fanar M. Al-Healya. (2021). Electrical Conductance and Theoretical Study of Glutamic Acid in Different Solvents at 310.16k, Egypt. J. Chem, 64(8), 4359 – 4367.

[2] Stefan Bröer. (2018). Amino Acid Transporters as Disease Modifiers and Drug Targets, SLAS Discovery, 23(4), 303–320.

[3] Hong-Wei ke. (2008). Theoretical study of glycine conformers, Journal of theoretical and computational chemistry, 7(4), 889-909.

[4] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel AB. (1994). Gaussian, Pittsburgh, PA.

[5] M. j. Frisch et al. (2004). GAUSSIAN 03, Revision C. 01, Gaussian Inc., Wallingford. CT.



ابرخازنهای هیبریدی با کارایی بالا بر پایه نانوساختارهای پوسته-هسته دوفلزی و نانوکرههای کربنی

سید امیرعلی حسینی واعظ' ، فرزانه حکمت'

۱: دانشجوی کارشناسی ارشد، شیمی (شیمی-فیزیک)، گروه شیمی تجزیه و شیمی-فیزیک، دانشکده علوم شیمی و نغت، دانشگاه شهید بهشتی، رایانامه (amirhosseini1399@gmail.com) ۲ : استادیار ، شیمی (شیمی-فیزیک)، گروه شیمی تجزیه و شیمی-فیزیک ، دانشکده علوم شیمی و نفت، دانشگاه شهید بهشتی، رایانامه (f_hekmat@sbu.ac.ir)

واژگان کلیدی: ابرخازنهای هیبریدی، نانوساختارهای پوسته-هسته، نیکل-منگنز، نانو کرههای کربنی

۱–مقدمه

با رشد فزاینده جمعیت، فقدان منابع سوخت فسیلی به عنوان مهمترین چالش پیش روی توسعه تکنولوژی مطرح است. از این رو، بشر همواره به دنبال یافتن منابع انرژی پاک، ایمن، ارزان، و تجدیدپذیر به عنوان جایگزینی مناسب برای سوختهای فسیلی بوده است. منابع انرژی تجدیدپذیر، قادر به تامین انرژی مورد نیاز بشر، بدون آثار آلایندگی برای محیط زیست هستند، پس نویدبخش جهانی پاک با امنیت انرژی میباشند. علی رغم مزایای بسیار این منابع انرژی، همواره عدم توان در عرضه و تقاضا، به عنوان یکی از چالشهای جدی پیش روی کاربرد عملی از آنها، مطرح بوده است. از این رو، اهمیت سیستمهای ذخیره انرژی در رفع این چالش بر کسی پوشیده نیست. در میان انواع سیستمهای ذخیره انرژی، ابرخازنها با دارا بودن ویژگیهایی منحصر به فرد از جایگاه ویژهای برخوردارند (Cheng, 2019). کاملا واضح است که ساخت این سیستمهای ذخیره انرژی با عملکرد بالا، مستلزم طراحي و توسعه مواد الكترودي با خواص فيزيكوشيميايي مطلوب مي باشد. تاكنون گستره وسيعي از مواد الكترودي در ساخت ابرخازنها مورد استفاده قرار گرفتهاند. از این میان، سولفیدها و فسفیدهای فلزی با توجه به خواص الکتریکی، مکانیکی، و گرمایی مناسب، توجهات بسیاری را به عنوان مواد الکترودی در کاربردهای ذخیره انرژی به خود جلب کردهاند (Karami, ا 2024. على رغم مزاياي متعدد سيستمهاي ذخيره انرژي بر پايه فلزات واسطه، اين سيستمها به طور ذاتي از مقادير دانسيته انرژی و طول عمر چرخهای محدود رنج میبرند. یکی از راهکارهای عملی برای رفع این چالش، استفاده از دو الکترود غیر یکسان در توسعه ابرخازنهای هیبریدی است. نانو مواد کربنی با دارا بودن مساحت سطح ویژه بالا، هدایت الکتریکی قابل توجه، قیمت ارزان، فراوانی در سطح زمین، و پایداری شیمیایی و الکتروشیمیایی خوب، همواره به عنوان بهترین گزینه برای توسعه الکترود منفی در ساخت ابرخازنهای نامتقارن مطرح بودهاند. از سال ۱۹۱۳ هیدروترمال کربنها به عنوان جایگزینی مناسب برای مواد کربنی با منشا فسیلی توجهات زیادی را برای کاربردهای متعدد به خود جلب کردهاند (Beguin, 2014).


۲-روش

در این کار، پس از سنتز مستقیم نانوسیمهای نیکل-سولفید بر فوم نیکل، نانو ساختارهای دو فلزی نیکل-منگنز بر روی بستر مذکور سنتز شدند. این الکترودها در نهایت به عنوان الکترود مثبت در ساخت ابرخازنهای نامتقارن مورد استفاده قرار گرفتند. از سوی دیگر، نانو ساختارهای کربنی که به روش هیدروترمال تهیه شده بودند، پس از اصلاح ساختار متخلخل، در ساخت الکترود منفی مورد استفاده قرار گرفتند.

۳-نتايج و بحث:

همانطور که در تصاویر میکروسکپ روبش الکترونی گسیل میدانی تهیه شده از الکترودهای مثبت (شکل ۱-الف) و منفی (شکل ۱-ب) به خوبی نشان داده شده است، ساختارهای هدف به طور موفقیت آمیز تهیه شدند.



شکل ۱: تصاویر میکروسکوپ روبش الکترونی الکترودهای (الف) مثبت و (ب) منفی

سپس رفتار الکتروشیمیایی هر یک از الکترودهای تهیه شده در پیکربندیهای سه و دو الکترودی و با تکنیکهای مختلف ولتامتری چرخهای، شارژ/دشارژ گالوانواستاتیک، و طیفسنجی امپدانس الکتروشیمیایی مورد ارزیابی قرار گرفتند (شکل۲). همانطور که در این شکل نشان داده شده است، الکترودهای مثبت (شکل ۲-الف-پ) و منفی (شکل ۲-ت-ج) از رفتارالکتروشیمیایی خوبی برای ساخت ابرخازنهای هیبریدی با عملکرد بالا برخوردار هستند.



۴-نتيجهگيرى:

نتایج به دست آمده برای الکترودهای مثبت و منفی توجیه *ک*ننده رفتار الکتروشیمیایی قابل توجه الکترودهای تهیه شده و قابلیت استفاده از آنها در ساخت ابرخازنهای هیبریدی با کارایی بالا میباشد.

منابع و مراجع:

[1] X. Cheng, S. Qian, H. Yu, H. Zhu, Y. Xie, R. Zheng, *et al.* (2019). BaNb_{3.6}O₁₀ nanowires with superior electrochemical performance towards ultrafast and highly stable lithium storage, *Energy Storage Mater.* 16, 400-410.

[2] Karami, Z., Hekmat, F., Chougale, M., Shahrokhian, S., Dubal, D. P. (2024) Flexible Hybrid Supercapacitor Achieving 2.2V with NiCo2S4/Polyaniline/MnO2 and N, S-co-doped Carbon Nanofibers for Ultra-High Energy Density, *Small.* 2404506.

[3] Beguin, F., Presser, V., Balducci, A., Frackowiak, E. (2014). Carbons and Electrolytes for Advanced Supercapacitors, *Adv. Mater.* 26, 2219-51.



بررسی جفت شدگی مولکول-نانوذره با ارائه مدل برهمکنشی دوقطبی-دوقطبی

مريم السادات حسيني بهارانچي ،فاطمه خليلي، زهرا جمشيدي

۱-کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه صنعتی شریف، mrym.hosseini78@sharif.edu ۲- دکتری فیزیک،اتمی مولکولی، دانشکده شیمی و دانشگاه صنعتی شریف ۳-دانشیار ، شیمی فیزیک،دانشکده شیمی و دانشگاه صنعتی شریف، njamshidi@sharif.edu

واژگان کلیدی: نشردهنده کوانتومی ، جفت شدگی ، برهمکنش دوقطبی-دوقطبی

۱–مقدمه

مطالعه نظری برهمکنشهای نور-ماده در مقیاس نانو در بین محققین این حوزه، از اهمیت بالایی برخوردار است. جفت شدگی نور با انتقالات اتمی و مولکولی در کاواک، بستری مناسب برای افزایش درک از خواص شیمیایی ماده فراهم می سازد. نانوکاواکهای پلاسمونی در شرایط دمایی اتاق می توانند با سطوح انرژی مولکول جفت شوند و بصورت بالقوه توانایی محصورسازی نور را دارا هستند. در طول سالهای گذشته، حالتهای کوانتومی نور در میکرو و نانوکاواکهای پلاسمونی به صورت تجربی مشاهده شده است. اخیرا علاقهی بیشتری به مطالعه سیستمهای هیبریدی در جفت شدگی قوی وجود دارد که در آن، حالت برانگیختهی یک یا چند نشردهنده (مولکول) با کاواک پلاسمونی برای تولید حالت های جدید (پلاریتون ها) ترکیب می شوند^(۱). مطالعات جفت شدگی قوی در دهه اخیر بسیار مورد توجه محققین در حوزه شیمی فیزیک بوده و در طیف گستردهای از کاربردها نظیر پردازش اطلاعات کوانتومی، حسگرهای کوانتومی و منابع تک فوتونی از اهمیت بسزایی برخوردار است.^(۳)لذا در پژوهش حاضر به ارائه مدل برهمکنشی بین مولکولها به عنوان نشردهندههای نانوکاواکهای کوانتوم پلاسمونی و بررسی جفت شدگی آنها در فواصل مختلف پرداخته شده است.

۲-روش

محاسبات حالت برانگیخته برای مولکول مورد مطالعه بیس(۴-پیریدیل) استیلن با استفاده از روش نظریه چگالی وابسته به زمان (TD-DFT) و انتخاب مجموعه پایه deft-TZVP و تابع PBE۰ با استفاده از نرم افزار ORCA انجام شده است. در این مقاله از مدل برهمکنشی دوقطبی-دوقطبی برای محاسبه جفت شدگی بین مولکولها استفاده شده است که مطابق فرمول (۱) محاسبه می شود.^(۴)

(٢)

 $\begin{bmatrix} E^{L} & E_{int}^{L-R} \\ E_{int}^{L-R} & E^{R} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{up} \\ \psi_{lp} \end{bmatrix} = E_{\pm} \begin{bmatrix} \psi_{up} \\ \psi_{lp} \end{bmatrix}$ که در آن، E_{int}از فرمول (۱) محاسبه می شود و E^R و E^L به ترتیب انرژی مولکول های راست و چپ می باشد. در تقریب دو قطبی، هر مولکول همانند یک نوسانگر هماهنگ در نظر گرفته می شود.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

٣-بحث

نخستین گام در مطالعه جفت شدگی تک مولکولها باهم، در نظر گرفتن دیمر آنهاست. لذا با درنظر گرفتن دیمر مولکول بیس(۴-پیریدیل) استیلن با دوقطبی انتقالی بزرگ، به بررسی مدل برهمکنشی (معادله(۱)) در فواصل مختلف مولکولها از هم (R)، پرداخته شده است. تک مولکول همانند یک سیستم دوحالته(حالت پایه و حالت برانگیخته با بزرگترین ممان دوقطبی) در نظر گرفت شده است. پس از محاسبه جفت شدگی مولکولها در ساختار دیمر، اختلاف انرژی ترازهای ساختار جفت شده با استفاده از تقريب دوقطبی(رابطه ۲) بدست آمده است. جهت بررسی صحت مدل برهمکنشی، نتایج حاصل با نتایج حاصل از TD-DFT مقایسه شده است. بدین منظور محاسبات حالت برانگیخته برای دیمر در فواصل مختلف انجام شده است. ممان دوقطبی قوی تک مولکول ها می تواند در سامانه جفت شده دیمر به صورت موازی و یا خلاف جهت هم، با یکدیگر جفت شوند و حالتهای روشن و تاریک را ایجاد کنند. این حالتهای روشن و تاریک برای دیمر با بررسی چگالیهای گذار حالات برانگیخته بدست آمده و سپس اختلاف انرژی بدست آمده از این حالات با مدل برهمکنشی دوقطبی-دوقطبی مقایسه شده است.

R: (Å)	E _{int} (eV)	$\Delta E_{\text{Dipolar}}(eV)$	$\Delta E_{TDDFT} (eV)$
١٢	•.• 47	۰.۰۹۴	۰.۱۸۹
١٣	•.•٣٧	۰.۰۷۴	۰.۱۱۸
14	۰.۰۲۹	۰.۰۵۸	۰.۰۸۶
۱۵	•.•74	۸۴۰.۰	• .• ۶ •
18	•.•7•	•.•*•	۰.۰۵۱
١٧	•.•18	۰.۰۳۲	۰.۰۴۱
٣٠	•.••٣	۰.۰۰۶	۰.۰۰۶
۴.	۰.۰۰۱	•.••٢	۰.۰۰۲

جدول۱: مقایسه اختلاف انرژی در تقریب دو قطبی با TD-DFT

۴–نتیجه گیری

از نتایج جدول ۱، مشاهده می شود که اختلاف انرژی بدست آمده برای دیمر در هر دو روش محاسباتی(تقریب دوقطبی و TD-DFT) با افزایش فاصله تک مولکولها از هم کاهش می یابد و نتایج حااصل از مدل برهمکنشی در فواصل دورتر با تقریب خوبی نتایج محاسبات TD-DFT را بازتولید می کند. بنابراین مدل برهمکنشی دوقطبی-دوقطبی در فواصل I< N آنگستروم برای جفت شدگی مولکولها مناسب میباشد. در فواصل نزدیک به دلیل همپوشانی توابع موج و اهمیت به شمار آوردن اثرات انتقال بار، لازم است مرتبههای دیگر تقریب چندقطبیها در نظر گرفته شود.



منابع و مراجع

[1] Bitton, O., & Haran, G. (2022). Plasmonic cavities and individual quantum emitters in the strong coupling limit. Accounts of chemical research, 55(12), 1659-1668.

[2] Törmä, P., & Barnes, W. L. (2014). Strong coupling between surface plasmon polaritons and emitters: a review. Reports on Progress in Physics, 78(1), 013901.

[3] Monroe, C. (2002). Quantum information processing with atoms and photons. Nature, 416(6877), 238-246.
[4] Jamshidi, Z., Kargar, K., Mendive-Tapia, D., & Vendrell, O. (2023). Coupling molecular systems with plasmonic nanocavities: A quantum dynamics approach. The Journal of Physical Chemistry Letters, 14(50),

11367-11375.



مطالعه برهم *ک*نش سیکلود *ک*سترینهای طبیعی با داروی کریزو تینیب به روش شبیهسازی دینامیک مولکولی

ليلا حكم آبادي '، الهام محبي '

۱ – استادیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور، تهران Email: l.hokmabadi@pnu.ac.ir ۲– دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور، تهران Email: e.mohebbi66@yahoo.com

واژگان کلیدی: شبیهسازی دینامیک مولکولی، سیکلودکسترین، کریزوتینیب

۱– مقدمه

کریزوتینیب یک مولکول کوچک مهارکننده کیناز است که بهعنوان یک داروی شیمی تراپی به طور گسترده برای درمان سرطان ریه استفاده میشود (شکل ۱) [۱]. باوجود خواص درمانی بالای کریزوتینیب، این دارو دارای عوارضی مثل اختلالات بینایی، درد معده، یبوست، زخمهای دهان و کاهش اشتها، سردرد و بی حسی، سوزش یا گزگز در دستها یا پاها است [۲]. برای کاهش این عوارض جانبی و محدودیتها، کریزوتینیب را میتوان در ماکرومولکول های مبتنی بر پروتئین یا کربوهیدراتهایی کاهش این عوارض جانبی و محدودیتها، کریزوتینیب را میتوان در ماکرومولکول های مبتنی بر پروتئین یا کربوهیدراتهایی کاهش این عوارض جانبی و محدودیتها، کریزوتینیب را میتوان در ماکرومولکول های مبتنی بر پروتئین یا کربوهیدراتهایی مانند سیکلودکسترینها محصور کرد. سیکلودکسترینها(CD) ، اولیگوساکاریدهای حلقوی شامل واحدهای گلوکوزی با پیوندهای آلفا ۱ و ۴ گلوکوپیرانوزی هستند (شکل ۱). CDهایی که دارای ۶, ۷ و ۸ واحد گلوکز هستند به ترتیب آلفا، بتا و گاما سیکلودکسترین نامیده میشوند و بیشترین کاربرد را دارند. ساختار فضایی CD باعث به وجودآمدن یک سطح آبدوست و پاداری حفره آبگریز میشود که به ایجاد کمپلکس درهم کمک میکند. این مولکول ها به دلیل توانایی در بهبود حلالیت و پایداری داروها با تشکیل کمپلکس درهم جای بین CDهای طبیعی آلفا، بتا و گاما سیکلودکسترین نامیده میشوند و بیشترین کاربرد را دارند. ساختار فضایی CD باعث به وجودآمدن یک سطح آبدوست و یک داروها با تشکیل کمپلکس درهم جای بین CDهای طبیعی آلفا، بتا و گاما سیکلودکسترین (CDA، می و CD) و داروی ضدسرطان داروها با تشکیل کمپلکس درهم جای بین CDهای طبیعی آلفا، بتا و گاما سیکلودکسترین (CDA، می و CD) و داروی ضدسرطان مین داروی فیدسرطان داروها با تشکیل کمپلکس درهم جای بین CDهای طبیعی آلفا، بتا و گاما سیکلودکسترین (CD، می و CD) و داروی ضدسرطان داروی شیا به می می می و در ای می و در می و در می و داروی و می می و در می در می داروی ضدی در می و یو در می دارو داروی استماده میشوند و در و عارد و پایداری در داروی نی می و در می و در می و در می و داروی و داروی و دارو می بود در داروی به می و در می و داروی می می و در می و دارو و دارو می می و در می و دارو می و داروی و دارو می و دارو می و دارو می و دارو می و دارو می و دارو می و دارو ما و دارو و

۲- روش کار

مختصات سهبعدی ساختار کریستالی کریزوتینیب از کتابخانه ترکیبات شیمیایی، پایگاه داده ZINC15 به دست آمد. همچنین، ساختارهای اولیهCD های طبیعی از پایگاه داده RCSB گرفته شده است. شبیهسازی MD برای CD طبیعی آزاد و همچنین کمپلکس با دارو در جعبه مولکولهای آب انجام شد. تمام شبیهسازیهای MD با استفاده از نرمافزار گرومکس و میدان نیروی Charmm36 اجرا شدند [۵]. در ابتدا، سیستمها با انجام کمینهسازی انرژی سیستم به تعادل رسیدند و سپس، دما به روش نوز – هوور در ۲۰۰ کلوین تنظیم شد. همچنین فشار با مجموعه هم دما – هم فشار (NPT) به روش پارینلو – رحمان روی



شکل ۱) ساختار هندسی کریزوتینیب و سیکلودکسترین های طبیعی

۳- بحث و نتیجه گیری

نتایج شبیهسازی MD برای سیدیهای آزاد در محیط آبی نشان داد که ساختار BCD در طول کل ns ۳۰۰ تغییر نکرده است، اما ساختارهای ACD و GCD دچار تغییر شدهاند. نمودارهایRMSD برای CD آزاد جهت ارزیابی تعادل در طول زمان شبیه سازی مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفتند (شکل۲). در نمودارهای ACD و GCD در ابتدای شبیه سازی MD از ۰ تا ۵۰ نانوثانیه، نوسان بالایی در RMSD مشاهده شده است، درحالی *ک*ه پس از ۵۰ نانوثانیه، اتمها در وضعیت پایداری قرار گرفتهاند. در موردBCD ، در کل زمان شبیه سازی، نوسانات نمودار محدود است. شبیه سازی های MD در جعبه مکعبی حاوی مولکول های آب جهت بررسی برهمکنش داروی کریزوتینیب با BCD ، ACD و GCD در طول ۳۰۰ نانوثانیه انجام گرفت. شکل ۲ عکسهای فوری از کمیلکس ACD-drug در زمانهای ۲۰۰ و ۳۰۰ نانوثانیه را نشان میدهد. همانطور که مشاهده می شود، کریزوتینیب تا حدی در حفره ACD قرار می گیرد، اما برخی از قسمتهای این دارو در خارج از حفره قرار می گیرند. همچنین این دارو با BCD و GCD نیز کمپلکس پایدار تشکیل میدهد. شکل ۲ نمودار RMSD برای ACD حالتهای آزاد و کمپلکس با دارو را طول زمان شبیهسازی نشان میدهد. به دلیل تعامل بین CD و کریزوتینیب، نمودارهای RMSD برای کمپلکس، نوسانات کمتری نسبت به CD آزاد نشان میدهند. نمودارهای مشابه برای BCD و GCD تثبیت کریزوتینیب در حفره سیکلودکسترین را تایید میکند. باتوجهبه استقرار کریزوتینیب در حفره CD و آزاد شدن مولکولهای آب، تعداد پیوندهای هیدروژنی بین CDها و مولکولهای حلال در CDهای محصور شده کمتر از CDهای آزاد است. همچنین GCD بیشترین و ACD كمترين تعداد پيوند هيدروژني را با كريزوتينيب تشكيل دادند. متوسط فاصله بين اتم فلوئور كريزوتينيب با نزديكترين اتم اکسیژن در GCD بیشتر از دو CD دیگر است که میتواند به علت بزرگتر بودن حفره داخلی آن باشد. بهطورکلی نتایج این تحقیق نشان می دهد که CDهای طبیعی گزینه مطلوب برای کیسوله کردن کریزوتینیب هستند.



منابع و مراجع

 Rothschild, S.I., Gautschi, O., (2013). Crizotinib in the treatment of non-small-cell lung cancer, Clin. Lung Cancer. 14, 473–480.

[2] Heigener, D.F., Reck, M., (2018) Crizotinib, Recent Results Cancer Res. 211, 57-65.

[3] Del Valle, E.M.M., (2004), Cyclodextrins and their Uses: A Review, Process Biochem. 39, 1033–1046.

[4] Fateminasab, F., Bordbar, A.K., Asadi, B., Shityakov, S., Zare Karizak, A., Mohammadpoor-Baltork, I., Saboury, A.A., (2022), Modified β-cyclodextrins: Rosmarinic acid inclusion complexes as functional food ingredients show improved operations (solubility, stability and antioxidant activity), Food Hydrocoll. 131, 107731 [5]Huang, J., Mackerell, A.D., (2013) CHARMM36 all-atom additive protein force field: Validation based on comparison to NMR data, J. Comput. Chem. 34, 2135–2145.



بررسی تشکیل کمپلکس درهم جای سیکلودکسترینهای اصلاح شده با داروی ارلوتینیب به روش داکینگ و شبیهسازی دینامیک مولکولی

لیلا حکم آبادی '، فرهاد غلام پور '

۱ - استادیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور، تهران Email: l.hokmabadi@pnu.ac.ir ۲، دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور، تهران Email: farhad.chemi@gmail.com

واژگان کلیدی: شبیهسازی دینامیک مولکولی، سیکلودکسترینهای اصلاح شده، ارلوتینیب

۱– مقدمه

ارلوتینیب (Erl) به عنوان یک داروی ضد سرطان هدفمند، برای درمان سرطان ریه، پانکراس متاستاتیک و چندین سرطان دیگر استفاده میشود (شکل ۱) [۱]. از عوارض جانبی این دارو میتوان به اسهال، درد عضلات و مفاصل، سکته مغزی، نارسایی کبد و سوراخ شدن دستگاه گوارش اشاره کرد. Erl ترکیبی با حلالیت کم، نفوذپذیری کم و فراهمی زیستی ضعیف است. بنابراین، برای غلبه بر عوارض جانبی و محدودیتها، میبایست این دارو را در ماکرومولکولهای مبتنی بر کربوهیدرات مانند سیکلودکسترینها رای غلبه بر عوارض جانبی و محدودیتها، میبایست این دارو را در ماکرومولکولهای مبتنی بر کربوهیدرات مانند سیکلودکسترینها (CDs) کپسوله کرد [۲]. سیکلودکسترینها، الیگوساکاریدهای حلقوی با پیوند گلیکوزیدی هستند که ساختار میکلودکسترینها (CDs) کپسوله کرد [۲]. سیکلودکسترینها، الیگوساکاریدهای حلقوی با پیوند گلیکوزیدی هستند که ساختار مولکولهای نامحلول در آب را در حفره داخلی آبگویند میتوند و نابراین میتوانند مخروطی شکل کوتاه شده دارند و دارای یک سطح بیرونی آبدوست و یک حفره داخلی آبگریز هستند و بنابراین میتوانند (BCD) کپسوله کرد [۲]. سیکلودکسترینها، الیگوساکاریدهای حلقوی با پیوند گلیکوزیدی هستند که ساختار مولکولهای نامحلول در آب را در حفره داخلی خود به دام بیندازند و فرایند دارورسانی را بهبود بخشند. بتا سیکلودکسترین مولکولهای نامحلول در آب را در حفره داخلی خود به دام بیندازند و فرایند دارورسانی را بهبود بخشند. بتا سیکلودکسترین (BCD) یکی از سیکلودکسترینهای طبیعی است که با توجه به اندازه مناسب حفره داخلی، در صنایع دارویی، غذایی و آرایشی و بهداشتی به طور گسترده استفاده میشود [۳]. به منظور بهبود حلالیت، پایداری، زیست سازگاری، و همچنین افزایش ظرفیت کرسولاسیون و در نتیجه کاهش عوارض جانبی نامطلوب، ساختار را با جایگزینی بعضی از مولکولهای آلی اصلاح می کنند [۴]. بر این ترموی مولول با جایگزینی بعضی از مولکولهای آلی اصلاح می کنند [۴]. در این تحقیق، اتصال دارویآE

۲- روش کار

مختصات سهبعدی ساختار کریستالی Erl از کتابخانه ترکیبات شیمیایی، پایگاه داده ZINC15 به دست آمد. همچنین، ساختار اولیه BCD طبیعی از پایگاه داده RCSB گرفته شد و سپس گروههای هیدروکسی پروپیل، متیل و آمین به طور تصادفی جایگزین هیدروژنهای BCD گردید و ساختارهای به دست آمده با نرم افزار گوسین بهینه شد. برای پیدا کردن بهترین حالت اتصال، از نرم فزار اتوداک استفاده شد و کمپلکس حاصل برای شبیهسازی MD آماده شد. با استفاده از نرمافزار گرومکس و میدان نیروی Charmm36 شبیه سازی MD برای CDهای آزاد و کپسوله شده انجام شد [۵]. ابتدا هریک از سیستمها با انجام کمینهسازی انرژی سیستم به تعادل رسیدند و سپس، دما به روش نوز – هوور در ۳۱۰ کلوین تنظیم شد. همچنین فشار با



شکل ۱) ساختار هندسی ارلوتینیب و سیکلودکسترینهای اصلاح شده

۳- بحث و نتیجه گیری

محاسبات شبیه سازی MD برای BCD های اصلاح شده در حالت آزاد و کمپلکس با دارو انجام شد. از آنجایی که گروههای عاملی آمین و متیل کوچک هستند و بنابراین انعطاف پذیری کمی دارند، ساختارهای AMB و RMB در طول زمان شبیه سازی تغییر قابل توجهی ندارند اما به دلیل انعطاف پذیری هیدروکسی پروپیل به عنوان گروه عاملی و تشکیل پیوندهای هیدروژنی درون مولکولی، ترکیب HPB پس از ۱۰۰ s تغییر کرد و حفره آن پس از ۲۰۰ sn زمان شبیه سازی بسته شد. عکسهای فوری از شبیه سازی در زمانهای مختلف نشان دهنده جایگیری Erl در حفره CDها می باشد(شکل ۲). تجزیه و تحلیل MSD برای مقایسه ساختارهای آزاد و کمپلکس BCD، نشان داد که سیستم AMB آزاد پس از ۱۴۰ sn به تعادل رسیده اما سیستم PMSI تا حدودی در کل زمان شبیه سازی نوسان دارد. در سیستمهای RMB آزاد و کمپلکس، نمودارهای MSD نسبتاً پایدار هستند، همچنین سیستمهای HPB آزاد و HPB: Erl سیستم RMS آزاد پس از ۱۴۰۰ مه بعادل رسیده دو بنابراین، اتمهای GPH در یک موقعیت پایدار باقی ماندهاند. نمودارهای تابع توزیع شعاعی (RDF) به تعادل مریدهاند و بنابراین، اتمهای HPB در یک موقعیت پایدار باقی ماندهاند. نمودارهای تابع توزیع شعاعی (EDP) همه سیستم مای آزاد و کمپلکس با شعاع قطع ۱۶/۶ نانومتر، از آبهای اطراف اتم اکسیژن (O) واحد D-۵-گلیکوپیرانوز به دست آمده و نتایچ در شکل ۲ نشان داده شده است. دو پیک برجسته در این شکل، نشان دهنده حضور و برهمکنش مولکول های آب با اتم اکسیژن در شکل ۲ نشان داده شده است. دو پیک برجسته در این شکل، نشان دهنده حضور و برهمکنش مولکول های آب با تم اکسیژن در شکل ۳ نیان داده شده است. دو پیک برجسته در این شکل، نشان دهنده حضور و برهمکنش مولکول های آب با تم اکسیژن در شکل ۳ نشان داده شده است. دو پیک برجسته در این شکل، نشان دهنده حضور و برهمکنش مولکول های آب با اتم اکسیژن در شکل ۳ نمان داده شده است. دو پیک برجسته در این شکل، نشان دهنده حضور و برهمکنش مولکول های آب با تم اکسیژن در شکل ۳ نوریق پیوند هیدروژنی است. همانطور که در تمام نمودارهای مشاهده می شود، شدت پیک در حالت کمپلکس کمتر در نمان ترین بیایچ نشان داد که کاهش شدت پیک در فرم پیچیده RMB و RM بیشتر است.



شکل ۲) عکس های فوری و نمودار RDF برای کمپلکس AMB-Erl



منابع و مراجع

[1] Barbuti, A.M., Zhang, G.-N., Gupta, P., Narayanan, S. & Chen, Z.-S. (2019). EGFR and HER2 Inhibitors as Sensitizing Agents for Cancer Chemotherapy. Elsevier Inc.

[2] Devasari, N., Parkash, C., Singh, C., Reddy, S., Kumar, V., Elizabeth, M. & Suresh, S. (2015) Inclusion Complex of Erlotinib with Sulfobutyl ether- β -Cyclodextrin: Preparation, Characterization, In silico, In vitro and In vivo Evaluation.pdf. Carbohydrate Polymers, 134: 547–556.

[3] Astray, G., Gonzalez-Barreiro, C., Mejuto, J.C., Rial-Otero, R. & Simal-Gándara, J. (2009) A review on the use of cyclodextrins in foods. Food Hydrocolloids, 23 (7): 1631–1640.

[4] Dora, C.P., Trotta, F., Kushwah, V., Devasari, N., Singh, C., Suresh, S. & Jain, S. (2016) Potential of erlotinib cyclodextrin nanosponge complex to enhance solubility, dissolution rate, in vitro cytotoxicity and oral bioavailability. Carbohydrate Polymers, 137: 339–349.

[5]Huang, J., Mackerell, A.D., (2013) CHARMM36 all-atom additive protein force field: Validation based on comparison to NMR data, J. Comput. Chem. 34, 2135–2145.



دانشگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آیان ۱۴۰۳

وجهارمين كنفرانس سمى فنربك إيران

فرحناز حمدى هولاسوا

واژگان كليدى: كوپليمريزاسيون، Ab Initio ، سطوح انرژى.

۱– مقدمه

شیمی محاسباتی در تعیین ویژگی های ساختاری و واکنش پذیری و سایر خواص اتم ها، مولکول های کوچک، ماکرومولکول ها، پلیمرها، جامدات و یا سایر سیستمها کاربرد دارد. دو مبحث عمده و متفاوت در شیمی محاسباتی جهت انجام محاسبات نظریه مکانیک مولکولی و نظریه ساختار الکترونی وجود دارد. روش های مکانیک مولکولی از قوانین فیزیک کلاسیک برای پیش بینی ساختار و خواص مولکول ها بهره می برند، در حالی که روش های ساختار الکترونی بر مبنای روابط بنیادین فیزیک کوانتومی بنا نهاده شده است. در علم مکانیک کوانتومی خواص مولکولی به حرکت الکترون ها و برهم کنش های الکترون ها و هسته مربوط می شود. علاوه بر این شیمی محاسباتی در بر گیرنده روش هایی همچون بهینه سازی، حداقل سازی، شبیه سازی، بررسی های ساختاری و سایر روش هایی است که در درک و پیش بینی رفتار سیستمهای مولکولی بکار می روند (Atkins et al., 2013). در این میان پلیمرها نقش مهمی در زندگی روزمره دارند. خواص پلیمرها را می توان با توجه به نیاز، توسط تغییر ساختار گروه تکرارشونده و جرم مولکولی آنها امکان پذیر کرد. در این بررسی سعی بر این شد تا سطوح انرژی واکنشگرهای درگیر در پلیمریزاسیون رادیکالی انجام شده، حدواسط ها و محصولات، با استفاده از مان تا معاصبه گردد.

۲- روش

در این مطالعه پلیمریزاسیون زنجیری کروتونیک اسید (1) به عنوان مونومر اصلی همراه با آلفا- متیل استایرن (2) در مجاورت پرسولفات پتاسیم (3) به عنوان آغازگر در دمای ۸۰ درجه سانتی گراد و به مدت یک ساعت، واکنش پلیمریزاسیون رادیکالی انجام شد. احتمال تولید دو محصول از نوع کوپلیمر توده ای (4) و آلترناتیو (5) در واکنش وجود داشت. (شکل ۱). (Wolf et al., 2020 ; Malins et al., 2015)



شکل ۱: واکنش کوپلیمریزاسیون کروتونیک اسید و آلفا متیل استایرن



شکل $\mathbf{F}:\mathbf{T}$ واکنشهای محتمل محاسبه شده برحسب کیلوکالری بر مول

۳- بحث و نتیجه گیری

در این بررسی سطوح انرژی واکنشگرهای درگیر در پلیمریزاسیون رادیکالی انجام شده، حدواسط ها و محصولات، با استفاده از ab initio محاسبه گردید چرا که با حمله آغازگر مراکز کایرال جدید و نهایتاً دیاسترومرهایی ایجاد می شود. با این محاسبات تئوری ساختار واقعی و نوع کوپلیمر سنتز شده تشخیص داده شد. همان طور که در شکل ۲ مشاهده می شود، نتایج محاسبات نشان داد که تغییرات سطوح انرژی برای کوپلیمر توده ای (4) کمتر از آلترناتیو (5) است. امکان کوپلیمر سنتز شده از نوع توده ای وجود دارد. یعنی مونومرهای کروتونیک اسید به دنبال هم وارد واکنش می شوند و سپس با مونومر آلفا- متیل استایرن واکنش می دهند. البته اگر بتوان داده های تجربی در مورد ساختار کوپلیمر سنتزشده را با نتایج ساختارهای محاسبه شده برای مقایسه داشت بهتر می توان نتیجه گیری نمود. (2022)

منابع و مراجع

[1] Atkins, P., & De Paula, J. (2013). Elements of physical chemistry. Third Edition Oxford University Press, USA.

[2] Wolf, A., Desport, S. J., Dieden, R., Frache, G., Weydert, M., Poorters, L., Schmidt, F. D., & Verge, P. (2020). Sequence-Controlled α-Methylstyrene/Styrene Copolymers: Syntheses and Sequence Distribution Resolution. Macromolecules 2020, 53(18) 8032–8040.

[3] Malins, E L., Watersonb, C., & Remzi Becer, C. (2015). Alternating copolymers of functionalized α -methyl styrene monomers and maleic anhydride. Polymer Chemistry, 6, 6543-6552.

[4] Mcmanus, N. T., Penlidis, A., & Dubé, M. A. (2002). Copolymerization of alpha-methyl styrene with butyl acrylate in bulk. Polymer 43(5):1607-1614.



M. Rezaei-Sameti, M. Heydari

^a Department of Applied Chemistry, Faculty of Science, Malayer University, Malayer, 65174, Iran Email: <u>mrsameti@malayeru.ac.ir</u>

In this project, the ability and potential of $B_{12}N_{12}$, $AlB_{11}N_{12}$, and $B_{12}N_{11}P$ nanocages to adsorb and identify the cyanogen bromide (BrCN) toxic gas in the environment has been investigated by the density functional theory (DFT) and time-dependent density functional theory (TD-DFT). The structures of all BrCN&B₁₂N₁₂, BrCN&AlB₁₁N₁₂, and BrCN&B₁₂N₁₁P complexes were optimized at the ω B97XD method at the 6-31+G (d, p) level of theory. From optimized structures, the adsorption energy (E_{ads}), thermodynamic parameters (Δ H and Δ G), quantum parameters, atom in molecule (AIM) topological parameters, reduced density gradient (RDG) plots, molecular electrostatic potential (MEP) plots, electron localized function (ELF), solvent effect, and UV-visible spectrum of all studied models were calculated in absence and presence of static electric field (SEF_{z+0.01}, SEF_{z+0.02}, SEF_{z+0.03}, SEF_{z+0.04} e.V). **Keywords**: B₁₂N₁₂ nanocage, Al and P atoms doped, BrCN, DFT, AIM

1. Introduction

Since cyanogen is a volatile compound with a low boiling point, it will quickly spread in the air and cause poisoning and environmental pollution. Therefore, the making of the sensitive sensor for its early detection and making a strong filter for its adsorption from the environment is essential, based on this the following research has been done[1,2]. Bhuvaneswari et al[3] investigated the toxic hydrogen cyanide (HCN) and cyanogen chloride (CINC) adsorption on the armchair arsenide (As-arm) nanoribbon. They found that As-arm nanoribbons can be suitable for adsorbing and detecting the CINC and HCN toxic gas. In the other work, Zhang and coworkers[4] revealed that B-doped CNTs can be used as a sensitive sensor and absorber of CICN and HCN toxic gaseous.

2. The computational method

In the current work, the adsorption configurations of cyanogen bromide (BrCN) gas from Br and CN sites on the $B_{12}N_{12}$, $AlB_{11}N_{12}$, and $B_{12}N_{11}P$ nanocages are optimized at the $\omega B97XD/6-31+G$ (d, p) level of DFT theory. The $\omega B97XD$ level of theory includes 22% Hartree-Fock exchange at the short range and 100% Hartree-Fock at the long range. All studied configurations are designed with Gauss view 06 software and the computational studies are done with the Gaussian 09 package. In all studied models, the optimization criteria for force and displacement are 0.00042 Ha and 0.0016 Ha/Boron, respectively. The vibrational frequency of all studied complexes is not imaginary, and all complexes are stable



Fig. 1 The optimized structure, RDG, ELF, and adsorption energies in gas and water solvent and enthalpy

3. Results and discussion

The E_{ads} values of B-1 and B-2 models are equal -36.31 kcal/mol. So doping of Al atoms increases the adsorption energy of BrCN with nanocage, while with doping P atoms the E_{ads} of BrCN with nanocage decrease significantly from a pure state of nanocage, so the $B_{12}N_{11}P$ nanocage is not a suitable candidate for BrCN adsorption. The amount of adsorption energy in the presence of strong fields is positive and the adsorption process becomes thermodynamically endothermic and unfavorable, instead, the process of cleaning the BrCN from the nanocage surface becomes more favorable. The global harness results that the η values of the B-1 and B-2 models (3.88 eV) are smaller than other complexes, so these models are more reactive than other models. The E_{gap} and η values of all studied models decrease as follows: A-1>C-1>A-2>C-2>B1=B-2 (see Fig 1).

4. Conclusion

The AIM and RDG results confirm that the type of bond is van der walls and electrostatic. The results of this study demonstrate that the $B_{12}N_{12}$ and $AlB_{11}N_{12}$ are suitable candidates for adsorbing and detecting BrCN toxic gas.

References

- Rezaei–Sameti M, Nourian M., (2021), Interaction of hydrogen sulfide with the pristine and B&N-doped beryllium oxide nanotube: DFT study, Journal of Sulfur Chemistry, 42: 51-66.
- [2] Scherer G., (2006) Carboxyhemoglobin and thiocyanate as biomarkers of exposure to carbon monoxide and hydrogen cyanide in tobacco smoke, Experimental and toxicological pathology, 58: 101-124
- [3] Bhuvaneswari R., Nagarajan V., Chandiramouli R.,(2019) Exploring adsorption mechanism of hydrogen cyanide and cyanogen chloride molecules on arsenene nanoribbon from first-principles, Journal of Molecular Graphics and Modelling, 89:13-21.
- [4] Zhang, L., (2006) Novel chemical sensor for cyanides: boron-doped carbon nanotubes, The Journal of Physical Chemistry B, 110:4671-4674.



بررسی نظری برهمکنش دارو ۵-فلویورواوراسیل، B12P12 با آدنین نوکلیو باز DFT، TD-DFT و AIM

M. Rezaei-Sameti, M. Heydari

Department of Applied Chemistry, Faculty of Science, Malayer University, Malayer, 65174, Iran E-mail mrsameti@malayeru.ac.ir

This work aims to scrutinize the role of boron phosphide nanocage $(B_{12}P_{12})$ as drug delivery in the adsorption and interaction of 5-Fluorouracil (5FU) drug on adenine nucleobase. For this aim, the structures of 5FU-drug with adenine, 5FU-drug with $B_{12}P_{12}$, nanocages, and 5FU@ $B_{12}P_{12}$ complexes with adenine nucleobase are optimized using at the $\omega B97XD/6-31+G$ (d, p) at the level of density functional theory, by utilizing Gaussian 09 software. The adsorption energy, quantum parameters, atom in molecule (AIM) and reduced density gradient (RDG), UV-visible spectrum of all studied complexes are computed at the above level of theory.

Keywords: B₁₂P₁₂, Sc doped, 5-Fluorouracil drug, Adenine, DFT

1. Introduction

Despite advances in the design and manufacture of effective drugs in the treatment of cancer and the control of the disease using chemotherapy methods, there are still many challenges facing drug chemists that can deliver targeted drug delivery to target cells as well as increase there is therapeutic effect. This factor has led chemists and pharmacologists to solve this problem and invent appropriate auxiliary compounds that both improve the effect of treatment and have a less biological effect on other healthy cells in the body. To this end, many studies have been conducted on the interaction of drugs with nanomaterials and their delivery to target cells. Among the nanoparticles studied in scientific reports, the fullerenes nanoclusters of the third and fifth groups of the periodic table involve (AlN)_n, (AlP)_n, (BN)_n, and (BP)_n have received more attention due to their polarity, high potential, and suitable energy gap. The fullerenes of group III and V (XY)_n are designed and made with different sizes, and the $X_{12}Y_{12}$ nanocages form is more stable than the others [1–4].

2. The details of the computational method

The geometrical structures of 5FU drug, adenine nucleobase, 5FU@B₁₂P₁₂, nanocage complexes, and 5FU@B₁₂P₁₂ complexes with adenine are optimized at ω B97XD/6-31+G (d, p) level of DFT theory. All studied complexes are designed by Gauss view software and calculations are done by Gaussian 09 software. The maximum optimization criteria and RMS for force and displacement are 0.00045 Hartree/Bohr and 0.00018 Bohr. Adsorption energy (E_{ads}) (Eq. 1) and thermodynamic parameters (Δ H and Δ G) in the gas and water media of all studied models are computed and results are exhibited in Table 1.

$$E_{ads} = E_{complex} - (E_1 + E_2) + BSSE \tag{1}$$

3. Results and discussion

A comparison of the E_{ads} results is evident in that the interaction of the 5FU drug with adenine (-23.1 kcal/mol) is more favorable than other adsorption models. The ΔH and ΔG values in the gas phase are negative and favorable. It is noteworthy that in the 5FU@B₁₂P₁₂&adenine complexes, the amount of E_{gap} significantly decreases from the 5FU@denine complex. The absolute value $\Delta G_{(sol)}$ for all

complexes is more than of the gas state, and the adsorption process is unfavorable. The RDG and LOL results demonstrate that the nature of the interaction between 5FU drugs with adenine in the presence of nanocage is electrostatic type. The λ_{max} of the 5FU@B₁₂P₁₂&adenine complexes is greater than other states (see Fig. 1).

Model	ΔH	$\Delta G_{(gas)}$	$\Delta G_{(sol)}$	E_{ads}	μ_d
	(kcal/mol)	(kcal/mol)	(kcal/mol)	(kcal/mol)	Debay
A-c-1	-20.27	-8.54	-2.57	-21.70	7.09
B-c-1	-5.96	-8.35	1.19	-4.67	5.09
A-d-1	-44.92	-29.59	-27.44	-47.19	19.02
B-d-1	-38.77	-26.21	-12.57	-40.39	18.22
A-c	-7.13	-2.68	0.12	-8.40	13.40
B-c	-45.22	-34.77	-13.13	-46.83	17.91
A-d	-6.36	-3.03	0.06	-7.67	5.94
B-d	-48.44	-36.95	-14.48	-49.83	17.71
FA-c	-21.79	-10.48	6.25	-23.10	8.54
FA-d	-9.36	-0.18	34.35	-10.79	7.25

Table 1 Adsorption energy, thermodynamic parameters in the water solvent of 5-FU@B₁₂P₁₂ nanocage complex interaction with Adenine (Ad).



Fig.1 optimized structures, LOL, RDG plots, UV-visible spectrum of 5-FU@B12P12 nanocage complex interaction with Adenine (Ad).

Conclusion

The results of this work confirm that $B_{12}P_{12}$ nanocages are good candidates for the delivery of 5FU drugs and can be used as sensitive sensors for detecting drugs in the biological system.



Reference

- [1] Padash R, et al. (2019), A Comparative Computational Investigation of Phosgene Adsorption on (XY)₁₂ (X = Al, B and Y = N, P) Nanoclusters: DFT Investigations, J Cluster Sci. 30: 203–218.
- [2] Strout D.L, (2000) Structure and Stability of Boron Nitrides: Isomers of B₁₂N₁₂, J. Phys. Chem. A. 104: 3364– 3366.
- [3] Rezaei-Sameti M, Shiravand E (2020), The thermodynamic, quantum, AIM and NBO study of the interaction of pyrazinamide drug with the pristine and transition metal-doped B₁₂P₁₂, Adsorption. 26: 955–970.
- [4] Rezaei-Sameti M, Zarei P (2018), NBO, AIM, HOMO–LUMO and thermodynamic investigation of the nitrate ion adsorption on the surface of pristine, Al and Ga doped BNNTs: A DFT study, *Adsorption*. 24(8): 757–767.





۲- روش

بهینه سازی همه ترکیبات و کمپلکس ها در سطح نظری M06-2X/6-31G(d,p) توسط بسته نرمافزاری Guassian 09 توسط بسته نرمافزاری M06-2X/6-31G(d,p) انجام شده است. به منظور بررسی مکانیسم افزایش مایکل کالکون ها در حضور متان تیول به عنوان مدلی از آمینواسید سیستئین، محاسبات اسکن دو بعدی در فاز گازی و در محلول (مدل حلال ضمنی) و همچنین در حضور یک، دو، پنج، و ده مولکول آب (مدل حلال صریح) انجام شده است.

۳- بحث

در این مطالعه، مکانیسم افزایش مایکل با دو شیوه مورد ارزیابی قرار گرفت. (۱) ابتدا متان تیول (MeSH) تجزیه نشده به مرکز واکنش نزدیک و حد واسط SER...MeSH را ایجاد میکند. سپس، از انتقال پروتون به مرکز مجاور محصول واکنش تولید میشود. (۲) ابتدا ⁻MeS به مرکز واکنش نزدیک شده و حد واسط ⁻SER...MeS ایجاد میشود. سپس با انتقال پروتون از مولکولهای حلال به مرکز مجاور محصول واکنش تولید میشود. برای انجام مراحل ذکر شده در شیوه اول از محاسبات اسکن دو بعدی و در شیوه دوم از اسکن معمولی استفاده شده است. در شیوه اول روی فواصل C4. (۲) مربوط به موقعیت بتا است) و H...S به طور همزمان به ترتیب اسکن کاهشی و افزایش انجام شده است. انتقال پروتون میتواند به وساطت مولکولهای حلال انجام شود. شیوه دوم از اسکن معمولی استفاده شده است. در شیوه اول روی فواصل C4. (۲) مربوط به موقعیت بتا است) و H...S به طور همزمان به ترتیب اسکن کاهشی و افزایش انجام شده است. انتقال پروتون میتواند به وساطت مولکولهای حلال انجام شود. شیوه دوم طی دو مرحله انجام میشود. ابتدا روی فاصله (۲)... کاهشی انجام میشود. محصول تعادلی اسکن مرحله اول برای اسکن مرحله دوم مورد استفاده قرار می گیرد. در اسکن مرحله دوم فاصله هیدروژن نزدیک ترین مولکول آب به کربن موقعیت آلفا (H...C3) اسکن میشود. در شکل ۲ نمونهای از اسکن دوم ماصله هیدروژن موتر یک مولکول آب به کربن موقعیت آلفا (H...C3) اسکن میشود. در شکل ۲ نمونهای از اسکن دوم عاصله هیدروژن زدیک ترین مولکول آب به کربن موقعیت آلفا (H...C3) اسکن میشود. در شکل ۲ نمونهای از اسکن



شکل ۱: نمونهای از اسکن دوبعدی متان تیول و کالکون در حضور یک مولکول آب

۴- نتیجه گیری

بررسی سنتیک افزایش مایکل نشان میدهد که سد انرژی در شیوهی اول بزرگتراست. از طرف دیگر، سد انرژی برای مرحلهی دوم از شیوه دوم بزرگتر از مرحلهی اول است. همچنین پایینتر سد انرژی در حضور ده مولکول آب به دست آمده است.



منابع

[1]. Zhuang, C., Zhang, W., Sheng, C., Zhang, W., Xing, C., & Miao, Z. (2017). Chalcone: a privileged structure in medicinal chemistry. Chemical reviews, 117(12), 7762-7810.

[2].Venkatesh, P., Jaiprakash, M., Prasad, P., Pillai, B., Sadhale, P. P., & Sinkar, V. P. (2007). Flavonoid biosynthesis in tea (Camellia sinensis). International Journal of Tea Science, 6(02), 11-17.

[3]. Menezes, J. C., & Diederich, M. F. (2019). Natural dimers of coumarin, chalcones, and resveratrol and the link between structure and pharmacology. European Journal of Medicinal Chemistry, 182, 111637.

[4]. de Paula, R. L. G., Duarte, V. S., Fernandes, F. S., Vaz, W. F., Ribeiro, I. N., Osório, F. A., ... & Napolitano, H. B. (2019). A Comprehensive Topological Analysis on a New Bromine-Chalcone with Potential Nonlinear Optical Properties. The Journal of Physical Chemistry A, 123(40), 8632-8643.

[5]. Costa, A. M., Bosch, L., Petit, E., & Vilarrasa, J. (2021). Computational Study of the Addition of Methanethiol to 40+ Michael Acceptors as a Model for the Bioconjugation of Cysteines. The Journal of Organic Chemistry, 86(10), 7107-7118.



بررسی بر هم کنشهای بین مولکولی هیستیدین و محلول های مائی مالتوز با استفاده از خواص حجمی و آکوستیکی

خاطره خانلرزاده^{او*،} حسين ايلوخاني^۲

۱. دکتری تخصصی، شیمی فیزیک، شیمی قیزیک ،شیمی و علوم نفت، آزمایشگاه شیمی تجزیه راک (khaterehkhanlarzadeh@gmail.com) ۲- استاد ، شیمی فیزیک، ، شیمی فیزیک ،شیمی و علوم نفت، دانشگاه بوعلی سینا، (iloukhani@basu.ac.ir)

واژگان کلیدی: هیستیدین، مالتوز، حجم مولی ظاهری، تراکم پدیری ایزنتروپیک ظاهری، بر هم کنش های بین مولکولی).

۱– مقدمه

بر هم کنش های مولکولی بین جفت سلولها و درون مجموعههای چند سلولی برای بسیاری از فرآیندهای بیولوژیکی مانند ارتباطات بین سلولی، تشکیل بافت و اندام، تعامل دارو و سلول، تقابل سلول و ویروس، واکنشهای ایمنی و متاستاز سرطان حیاتی است و ارگانیسمهای چند سلولی برای کنترل فرآیندهای فیزیولوژیکی مانند تشکیل بافت، انتقال عصبی و پاسخ ایمنی به تعاملات فیزیکی سلول-سلول وابسته هستند (Ronero 1999) . با درک مکانیسم پنهان برای کنترل مولکولهای یک سلول دانشمندان اعلام کردندکه اساس حیات در تماس مولکولها و اتصال آنها به مولکولهای دیگر خلاصه میشود. قوانین حاکم بر پایداری ترمودینامیکی و تاخوردگی پروتیین ها سال ها است که توجه محققین را به خود جلب کرده است (Yan 2004). تاوع ویژگی های آمینواسیدها تاثیر بسزایی در پایداری کنفورماسیونی پروتیین ها دارد. مشخص شده است که یکپارچگی ساختار پروتیین بطور عمده به انواع برهمکنش های ضعیف وابسته است که در بین آنها برهمکنش واندروالس به علت تعداد زیاد از اهمیت ویژه ای برخوردار است (Banipal 2008). لذا در این پروزه خواص ترمودینامیکی و اکوستیکی محلولهای شامل آنزیمها واسیدهای آمینه با ساکاریدها به منظور درک برهم کنشهای بین مولکولی در این دسته از ترکیبات که از نظر بیولوژیکی بسیار واسیدهای آمینه با ساکاریدها به منظور درک برهم کنشهای بین مولکولی در این دسته از ترکیبات که از نظر بیولوژیکی بسیار

۲- روش

از آنجا که خلوص مواد در هر کار تحقیقاتی از اهمیت ویژه ای برخوردار است ابتدا از خلوص مواد اطمینان حاصل گردید. سپس با توجه به حلالیت هیستیدین در محلول های آبی مالتوز با ترکیب درصد متفاوت، مخلوط سه تایی هیستیدین + آب + مالتوز در مولالیته های مختلف ساخته شد. برای ساختن ترکیب درصد محلول های آبی مالتوز و مولالیته های مختلف هیستیدین در محلول آبی مالتوز، از ترازوی دیجیتال Metler مدل AB204N با دقت ۲۰۰۰۱ گرم، استفاده شده است. برای اندازه گیری چگالی و سرعت صوت محلول ها از دستگاه چگالی سنج آنتون پار مدل DSA 5000 استفاده شده است.

۳- بحث ونتيجه گيري

پس از انتخاب سیستم (هیستیدین + مالتوز + آب) به منظور بررسی بر هم کنشهای بین مولکولی بین آمینو اسید هیستیدین به عنوان بنیان ساختاری پروتئینها و محلولهای مائی مالتوز به عنوان ترکیب اصلی در جداره سلولی محلولهایی با ترکیب درصدهای مختلف تهیه و دانسیته و سرعت صوت محلول های تهیه شده توسط دستگاه دانسیتومتر آنتون پار مدل (DSA (5000) اندازه گیری شد. سپس با استفاده از کمیات اندازه گیری شده چگالی و سرعت صوت حجم مولی ظاهری با استفاده از رابطه ۱، حجم مولی ظاهری در رقت بی نهایت، تراکم پذیری ظاهری با استفاده از رابطه ۲ و تراکم پذیری ظاهری در رقت بی نهایت و کمیات انتقالی مرتبط محاسبه شدند. نتایج نشان داد که در محلول های فوق بر هم کنش بین حلاه حل شونده قویتر از برهم کنش بین حل شونده-حل شونده بوده ایت و هیستیدین می تواند ساختار دی ساکارید را شکسته و در آن نفوذ کند (2009).

$$V_{\phi} = \frac{M}{\rho} - \frac{1000(\rho - \rho_0)}{m\rho\rho_0}$$

 $K_{s,\phi} = -\left(\frac{\partial V_{\phi}}{\partial P}\right)_s = \frac{1000(k_s\rho_o - k_s^0\rho)}{m\rho\rho_o} + \frac{Mk_s^0}{\rho}$



شکل ۱.

(1)



[1] C.M. Ronero, E. Moreno, J.L. Rojas, Thermochim. Acta 328 (1999) 33-38 [2] Z. Yan, J. Wang, W. Kong, J. Lu, Fluid Phase Equilib. 215 (2004) 143–150. [3] T.S. Banipal, J. Kaur, P.K. Banipal, K. Singh, J. Chem. Eng. Data 53 (2008) 1803–1816.
[4] A. Pal, N. Chauhan, Indian J. Chem. 48A (2009) 1069–1077



مطالعه خواص الکتروشیمیایی الکتروکاتالیستهای چهارچوب فلز-آلیCO و Ni-Co بر روی فوم نیکل و کاربرد آن به عنوان آند در پیلهای سوختی اوره

میر قاسم حسینی^{او*}، حنانه خانامیری^۲

۱ و *- استاد تمام، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی- مرکز تحقیقاتی الکتروشیمی و دانشگاه تبریز Emai:mg-hosseini@tabrizu.ac.ir ۲- دانشجوی کارشناسی ارشد ، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی و دانشگاه تبریز Email:hana.khanamiri@gmail.com

واژگان كليدى: الكتروكاتاليست، فوم نيكل، چارچوب فلز-آلى، پيل سوختى، پيل سوختى مستقيم اوره.

۱– مقدمه

الکتروکاتالیستهای مبتنی بر چارچوبفلز-آلی به دلیل ساختار منحصر به فرد و قابل تنظیم، به عنوان یکی از موثرترین مواد برای استفاده در فرآیند الکتروشیمیایی و مخصوصا پیلهای سوختی مورد توجه قرار گرفتهاند. مواد مشتق شده از چارچوبفلز-آلی (MOF) به طور گسترده برای کاربردهای پیل سوختی مورد مطالعه قرار گرفتهاند. در این مطالعه، چارچوبفلز-آلی جدید با استفاده از ترکیبات نیکل و کبالت (Ni-doped-Co MOF, Co-MOF) طراحی و بر روی فوم نیکل تثبیت شدهاست تا بتوان الکتروکاتالیست اقتصادی و کارآمد برای اکسیداسیون اوره در پیل سوختی مستقیم اوره عمل کند[۱].

۲-روش

چارچوبهای فلز-آلی CoNi و Co با استفاده از روش سولوترمال سنتز شد. ترکیب اولیه شامل Ni(NO₃)₂.6H₂O، Ni(NO₃)₂.6H₂O و بنزن دی کربو کسیلیک اسید (BDC) به عنوان لینکر بود که نمک و لینکر در محلول دی متیل فرم آمید(O(NO₃)₂.6H₂O) و سود حل شد. سپس محلول اتانول اضافه شد. در مرحله بعد، محلول بدست آمده و فوم نیکل تریتمنت و به یک اتوکلاو تفلونی منتقل شد و تحت شرایط سولوترمال قرار گرفت. پس از سرد شدن اتوکلاو در شرایط محیطی، چارچوب فلز-آلی اتوکلاو در شرایط محیطی، چارچوب فلز-آلی سنتز شده با محلول آب و اتانول شده شد (۲).

۳- بحث و نتایج

برای ارزیابی فعالیت الکتروشیمیایی الکترودهای NiCo-MOF و Co-MOF از تکنیک ولتامتری چرخهای استفاده شد. با توجه به شکل ۱ جریان مشاهده شده در پیک اکسیداسیون برای الکترود CoNi-MOF/NF برابر با ²⁻mA.cm از برای Co-MOF/NF برابر با²⁻mA.cm رابر با² مست که نسبت به نیکلفوم خالص که جریانی برابر با 10 mA.cm دارد، بالاتر است. طيف سنجی امپدانس الکتروشيميایی نيز برای بررسی رفتار الکتروشيميایی الکترودهای سنتز شده استفاده شد. نتايج EIS با توجه به شکل ۲ نشان داد که مقاومت انتقال بار برای الکترود مقدار مقاومت انتقال بار برای الکترود Co-BDC/NF برابر با 0.82 اهم و برایCoNi-BDC/NF برابر 0.14 اهم و برای فوم نيکل 14.76 اهم است. کاهش مقاومت درالکتروکاتاليست CoNi-BDC/NF نشان دهنده فعاليت الکتروکاتاليستی قابل توجه الکترود سنتز شده است.

ان ٢٩ و ٣٠٠ پار ٢٠٠



شکل۱: ولتامتر چرخهای در 0.5M NaOH و 0.05M اوره



شکل۲: نمودار نایکوئیست و مدار معادل مرتبط

برای ارزیابی موفقیت آمیز بودن سنتز مافهای ذکرشده، از تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) استفاده شد. تصاویر SEM نشان دادند که MOF به خوبی روی فوم نیکل تثبیت شده و ساختار کریستالی مناسبی دارد. همچنین، سطح فومنیکل دارای پوششی یکنواخت از نانوذرات است که نشاندهنده توزیع همگن MOF برروی بستر نیکل است.



شكل ٣: SEM الكترود (الف) Co-MOF/NF و (ب) SEM



۴– نتیجه گیری

نتایج حاصل از این تحقیق نشانداد که الکترودهای NiCo-MOF/NF نسبت به Co-MOf/NF الکتروکاتالیستی کارآمدتر و پایدارتر برای الکترواکسیداسیون اوره است. ساختار و ویژگیهای منحصربهفرد این نوع از الکترودها ، آنها را به گزینهای مناسب برای کاربردهای مختلف الکتروشیمیایی مانند پیل سوختی تبدیل کرده است. این مطالعه امکان استفاده از اوره به عنوان سوخت در پیل سوختی پلیمری را به عنوان منبع انرژی تجدید پذیر و پاک تایید میکند.

منابع و مراجع

[1] Li, Y., Wu, Y., Li, T., Lu, M., Chen, Y., Cui, Y., ... & Qian, G. (2023). Tuning the electronic structure of a metal–organic framework for an efficient oxygen evolution reaction by introducing minor atomically dispersed ruthenium. *Carbon Energy*, *5*(2), e265.

[2] Hu, F., Yu, D., Zeng, W. J., Lin, Z. Y., Han, S., Sun, Y., ... & Peng, S. (2023). Active Site Tailoring of Metal-Organic Frameworks for Highly Efficient Oxygen Evolution. *Advanced Energy Materials*, *13*(29), 2301224.



مطالعه جذب گاز نیتروژن اکسید برروی نانوصفحات خالص و تزریق شده تی گرافن

مهرشاد خورشیدی، سیفاله جلیلی، آتنا پاکزادیان

۱ و ۱- نویسنده مسئول: کارشناسی ، شیمی و خواجه نصیرالدین طوسی، رایانامه (mehrshad.sunny@gmail.com) ۲-استاد تمام، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و خواجه نصیرالدین طوسی، رایانامه (sjalili@kntu.ac.ir) ۳- پسادکتری، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و خواجه نصیرالدین طوسی، رایانامه (a.pakzadiyan@email.kntu.ac.ir)

واژگان کلیدی: تی گرافن، بور و نیتروژن، گوسین، نیتروژن مونواکسید، سنسور

۱– مقدمه

حسگرهای شیمیایی بر پایه نانو ساختار کربن، ابزارهایی هستند که از نانومواد کربنی مانند نانوذرات کربنی، نانولولههای کربنی (CNTs) و گرافن برای شناسایی و اندازه گیری مواد شیمیایی استفاده می کنند. این حسگرها به دلیل ویژگیهای منحصر به فرد نانومواد کربنی، از جمله سطح بزرگ، خواص الکتریکی و شیمیایی خاص، در تشخیص مواد بسیار حساس و کارآمد هستند. این نانو حسگر ها از مزایایی برخوردار اند که آن ها را مورد توجه قرار میدهد. نانو ساختارهای کربنی به دلیل نسبت سطح به حجم بالا، قادر به شناسایی مقادیر بسیار کم از مواد شیمیایی هستند و همچنین با استفاده از پوششهای خاص، می توانند به طور خاص به یک نوع ماده پاسخ دهند. از دیگر مزایای این ترکیبات می توان به سرعت پاسخ دهی و قابلیت ترکیب با فناوری های دیگر اشاره کرد.

۲- روش

در این پروژه تحقیقاتی با استفاده از نرم افزار گوسین ۹۰ و با انتخاب سطح محاسباتی(d) 31g(d) 31g(d) تمامی محاسبات انجام شدند. علت انتخاب این سطح محاسبات توانمندی تابعی M062X به عنوان یک تابعی هیبریدی در اعمال برهمکنشهای ضعیف واندروالس در کنار برهمکنشهای قوی شیمایی است. همچنین طبق مطالعات پیشین مجموعه پایه انتخاب شده به عنوان گزینه مناسب در توصیف و بررسی برهمکنش بین گونه های خارجی و نانوصفحات بر پایه کربن معرفی شده است. با توجه به آرایش الکترونی گاز NO و همچنین تزریق اتمهای بور و نیتروژن که موجب پدید آمدن الکترون تک در سیستمهای کربنی میشوند، محاسبات انجام شده به صورت اسپین-قطبیده صورت گرفتهاند.

۳- بحث

ساختار بهینه شده تی – گرافن منتخب برای مطالعه در این پژوهش در شکل ۱ نشان داده شده است. به منظور فراهم آوردن محیط شیمیایی مشابه با ساختار دوبعدی تی-گرافن، کربنهای مرزی با اتم هیدروژن اشباع گردیدند. بر اساس شکل ۱، ساختار

داسگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳



شکل ۱. ساختار خوشه مولکولی تی-گرافن

به منظور ارزیابی پایداری دینامیکی سیستم و مطالعات ترموشیمیایی محاسبات فرکانسی در همان سطح محاسباتی مذکور انجام گرفته است. عدم وجود فرکانسهای موهومی حاکی از پایداری دینامیکی سیستم مذکور است. با هدف بررسی اثر تزریق اتمهای بور ونیتروژن بر روی خواص ساختاری، الکترونی و حسگری تی-گرافن، اتمهای مذکور در ساختار T-Gr جایگزین عنصدر کربن شده و دو نانوصفحه B-T-Gr و N-T-Gr پدید آمد. شکل ۲ ساختار این دو ترکیب را نشان میدهد.



شكل ۲. ساختار بهينه شده تركيب الف B-T-Gr)و بN-T-Gr)

۴– نتیجه گیری

براساس نتایج بدست آمده، ساختار تی-گرافن بدلیل داشتن یک سیستم الکترونی نامستقر بسیار قوی دارای پایداری بوده و پذیرای گونه خارجی برای برهمکنش نیست. با تزریق اتمهای بور و نیتروژن، که به ترتیب از نوع p و n هستند، این سیستم پایدار الکترونی آماده برهمکنش با گاز سمی NO شد. انرژی جذب محاسبه شده نشان داد که قدرت برهمکنش دو نانوصفحه تزریق شده با اتمهای بور و نیتروژن به مراتب بیشتر از سیستم کربنی است.

14.17.070.79

منابع و مراجع

[1] Tong, Z., Pecchia, A., Yam, C., Dumitrică, T., & Frauenheim, T. (2022). Ultrahigh Electron Thermal Conductivity in T-Graphene, Biphenylene, and Net-Graphene. *Advanced Energy Materials*, *12*(28), 2200657.
[Y] Zhou, W., Luo, C., Chao, Y., Xiong, S., Long, M., & Chen, T. (2024). First-principles study on the electronic properties of biphenylene, net-graphene, graphene+, and T-graphene based nanoribbons. RSC advances, 14(12), 8067-8074.



۲-روش

قدم اول برای مدل کردن سیستمها با معادله حالت انتخاب داده مناسب و معتبر است که در کار قبلی ما انجام شدهاست (Pakravesh, Zarei et al. 2021). انتخاب تابع هدف نیز قدم مهم بعدی برای شروع محاسبه پارامترها است. تابع هدف انتخابی شامل جملههای فشار(P)، چگالی(q) و دما(T) در معادله (۲) است. در نهایت پارامتری که کمترین مقدار درصد انحراف مطلق (AAD%) تابع هدف را دارا بود به عنوان پارامتر سیستم انتخاب شد.

$$OF = \frac{1}{n} \left[\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{|P_{exp} - P_{cal}|}{P_{exp}} \right) + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{|\rho_{exp} - \rho_{cal}|}{\rho_{exp}} \right) + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{|T_{exp} - T_{cal}|}{T_{exp}} \right) \right]$$
(7)
c a solution of the second state of the second



شکل ۱: نمودار ستونی مقایسه متوسط درصد انحراف مطلق (AAD%) دما، چگالی و فشار برای سیستمها به تفکیک گروه آلی

شکل (۲) نتیجه تعادل مایع-بخار را نمایش میدهد. از آنجاکه در محاسبه پارامترهای PC-SAFT از دادههای فشار بخار و چگالی اشباع استفاده شده است و در کار ما از دادههای دما چگالی و فشار استفاده شدهاست، پیش بینی کار جدید قابل قبول است.



شكل ۲: نمودار ستوني مقايسه متوسط درصد انحراف مطلق (AAD%) تعادل مايع-بخار براي سيستمها به تفكيك گروه آلي



منابع و مراجع

[1]Barker, J. A. and D. Henderson (**1967**). "Perturbation theory and equation of state for fluids. II. A successful theory of liquids." The Journal of chemical physics 47(11): 4714-4721.

[2] Chapman, W. G., K. E. Gubbins, G. Jackson and M. Radosz (**1989**). "SAFT: Equation-of-state solution model for associating fluids." Fluid Phase Equilibria 52: 31-38.

[3] Chapman, W. G., K. E. Gubbins, G. Jackson and M. Radosz (1990). "New reference equation of state for associating liquids." Industrial & engineering chemistry research 29(8): 1709-1721.

[4] Huang, S. H. and M. Radosz (1990). "Equation of state for small, large, polydisperse, and associating molecules." Industrial & Engineering Chemistry Research 29(11): 2284-2294.

[5] Pakravesh, A., F. Zarei and H. Zarei (**2021**). "PpT parameterization of SAFT equation of state: developing a new parameterization method for equations of state." Fluid Phase Equilibria 538: 113024.



تهیه، ارزیابی ویژگی های بیوفیزیکی و زیستی لیپوزوم کاتیونی مترونیدازول

رابعه خوشنويس زاده

استادیار، گروه بیوشیمی-بیوفیزیک، دانشکده علوم زیستی، واحد ورامین-پیشوا، دانشگاه آزاد اسلامی، ورامین-پیشوا، ایران و Ra.khoshnevis@iau.ac.ir و biologybiophysics

واژگان کلیدی: لیپوزوم، مترونیدازول، سنتز، حامل دارو

۱– مقدمه

امروزه نانوبیوتیک ها که از ترکیب آنتی بیوتیک با انواع نانوساختارها شامل لیپوزوم، ذرات لیپیدی، میسل، کوانتوم دات، نانوذرات فلزی(طلا، نقره، روی، زینک ...) شکل میگیرند در جهت افزایش اثر گذاری بیشتر آنتی بیوتیک ها پایه گذاری شده اند. در میان طیف گسترده از نانوپلتفرمهای حامل دارو، لیپوزوم ها که ساختاری همانند غشاهای زیستی دارد بعنوان سیستم تحویل کارآمدی برای داروهای ضد باکتری مورد توجه قرار گرفته است. دیواره لیپوزوم ها از دو لایه لیپید تشکیل شده که دم های ابگریز لیپیدها به سمت یکدیگر و سرهای آبدوست در مجاورت با فضای بیرونی و حفره داخلی است از این رو امکان بارگیری هم داروهای آبدوست و هم آبگریز را دارد. در این مطالعه داروی مترونیدازول در فرمولاسیون های متنوعی از لیپوزوم تهیه شده و ویژگی های بیوفیزیکی و میزان اثربخشی ان بر روی یکی از جدایه اشیرشیاکلای مورد بررسی قرار گرفته است.

۲- روش

تهیه فرمولاسیون های لیپوزومی: در این مطالعه لیپوزوم های کاتیونی حاوی مترونیدازول و بدون دارو با روش تبخیر فاز حلال تهیه شد. برای این منظور ۲۰۶۶ مولار فسفولیپید (فسفولیپون جی ۸۰ از شرکت لیپویید)، ۲۰۳۳ مول کلسترول و ۲۰۱۶ مول استئاریل آمین در کلروفرم حل و به دستگاه روتاری متصل گشت پس از تبخیر کلروفرم، فیلم خشک فسفولیپیدی در انتهای بالون باقی ماند. در مرحله هیدراتاسیون، ۲۰۱۱ مول مترونیدازول حل شده در ۱۰ میلی لیتر بافرفسفات کم کم به بالون اضافه و عملیات ورتکس تا شکل گیری محلول همگن لیپوزومی ادامه یافت. برای تهیه لیپوزوم های بدون دارو در مرحله هیدراتاسیون فقط از بافرفسفات استفاده شد. ارزیابی ویژگی های بیوفیزیکی و میکروبی هر فرمولاسیون: شکل: با کمک میکروسکوپ الکترونی روبشی از همه فرمولاسیون ها تصویر تهیه شد. بار و اندازه: دستگاه نانو زتا سایزر(مالورن) متوسط اندازه ذرات لیپوزومی و موجنین بار سطحی هر یک را با کمک روش DLS اندازه گیری کرد. درصد انکپسولاسیون به روش غیرمستقیم: پس از جداسازی ندازت لیپوزومی از فاز پیوسته با سانتریفیوژ یخچال دار، با تکنیک VU اسپکتروفتومتری مقدار مرون درون سوپرناتانت ندازه گیری شد. پایداری فیزیکی: روزانه ظاهر فرمولاسیون های نگه داری شده درون یخچال ارزیابی شد تا زمان دو فاز شدن ندازه گیری شد. پایداری فیزیکی: روزانه ظاهر فرمولاسیون های نگه داری شده درون یخچال ارزیابی شد تا زمان دو فاز شدن این فرمولاسیون ها بدست آید. ارزیابی قدرت ضد میکروبی: کمترین غلظت مهار کنندگی (MIC) نمونه های لیپوزوم کاتیونی این فرمولاسیون ها بدست آید. ارزیابی قدرت ضد میکروبی: کمترین غلظت مهار کنندگی (MIC) نمونه های لیپوزوم کاتیونی مترونیدازول، لیپوزوم کاتیونی بدون دارو، مخلوط لیپوزوم کاتیونی بدون دارو + محلول مترونیدازول و محلول مترونیدازول در

۳- بحث

تصاویر میکروسکوپ الکترونی حاکی از شکل گیری ساختار های کروی لیپوزوم ها در هر دو فرمولاسیون لیپوزومی بود (شکل۱). علی رغم عدم استفاده از تکنیک های کوچک سازی مثل هایپرژر، اکسترودر و سونیکاتور متوسط اندازه ذرات لیپوزوم حاوی دارو ۴۲۳ و بدون دارو ۸۲۰ mm بدست آمد. در حالیکه Dahra و همکارانش که از همین روش استفاده کرده بودند ذرات لیپوزومی بزرگی در محدوده ۱۱ تا ۱۷ میکرومتر تهیه کردند. درصد مولی های بکار گرفته شده در فرمولاسیون امکان تهیه ليپوزوم های کاتيوني با ۳۵+ و ۳x + به ترتيب برای ليپوزوم بدون دارو و ليپوزوم مترونيدازول فراهم کرد. معمولا درصد انکپسولاسیون داروهای محلول در آب که به روش تبخیر فاز حلال تهیه می شوند پایین است اما در این مطالعه درصد مترونیدازول محصور شده در لیپوزوم کاتیونی ٪۸۲ بدست آمد. در مطالعات مشابه مثل تحقیق Dahra و همکارانش درصد انکپسولاسیون ٪۱۳ تا ۳۷٪ [۱] و مطالعه Čeljka Vanić ،[۲] ۴۸ Chen Shuhua و همکارانش ۵۵٪ [۳] بدست آمد. هر دو فرمولاسیون لیپوزومی های تهیه شده به مدت ۵ ماه پایداری فیزیکی خود را حفظ کرده و تشکیل دو فاز ندادند به نظر میرسد دافعه الکترواستاتیک بر جاذبه واندروالسی میان لیپوزوم های باردار غلبه داشته و مانع از نزدیک شدن آنها به یکدیگر گشته و پایداری فیزیکی را فراهم آورده است. نتایج میکروبی نشان داد محلول مترونیدازول که بعنوان شاهد بکار گرفته شده است در غلظت Mmg/ml و مخلوط ليپوزوم كاتيونى بدون دارو+ محلول مترونيدازول در غلظت mg/ml ۴ ليتر و ليپوزوم کاتیونی مترونیدازول در غلظت mg/ml ۲ توانستند باعث مهار رشد اشیرشیاکلای شوند و لیپوزوم کاتیونی بدون دارو نتوانست تاثیری بر مهار رشد باکتری داشته باشد. قدرت ضد میکروبی لیپوزوم کاتیونی مترونیدازول ۴ برابر محلول مترونیدازول بوده است. به نظر میرسد بار مثبت لیپوزوم امکان اندرکنش بیشتر با لیپوپلی ساکاریدهای آنیونی سطح باکتری را فراهم کرده و بر ورود داروی بیشتر به درون باکتری موثر بوده است بطوریکه مخلوط لیپوزوم خالی به همراه محلول مترونیدازول نیز دو برابر قدرت ضد میکروبی بیشتر نسبت به محلول مترونیدازول داشته است.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳



شکل۱: تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از لیپوزوم کاتیونی مترونیدازول (راست) و لیپوزوم کاتیونی بدون دارو (چپ)

۴– نتیجه گیری

درصد مولی مواد بکار گرفته شده و روند تهیه لیپوزوم کاتیونی امکان شکل گیری لیپوزوم هایی در ابعاد نیم میکرون و بار کاتیونی مناسب را فراهم کرده است. ابعاد، بار و درصد انکپسولاسیون بالا در لیپوزوم کاتیونی مترونیدازول باعث افزایش قدرت ضد میکروبی آن در برابر اشیرشیاکلای شده است.



- [¹] Patel, D. B., & Patel, J. K. (2009). Liposomal drug delivery of metronidazole for the local treatment of vaginitis. *Int. J. Pharm. Sci. Nanotechnol*, 2(1), 421-427.
- [^Y] Chen, S. H., Liu, X. W., Zhan, S. P., Yu, C., & Zhang, J. (**2013**). Preparation and characterization of metronidazole liposome by supercritical reverse phase evaporation method. *Advanced Materials Research*, *668*, 274-278.
- [^r] Pavelić, Ž., Škalko-Basnet, N., & Jalšenjak, I. (**1999**). Liposomes containing drugs for treatment of vaginal infections. *European journal of pharmaceutical sciences*, 8(4), 345-351.


مطالعه ساختار ملیتین و پپتید MDP1 با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی

یسرا دلشاد ^۱، خالد عزیزی^{۱و*،} مختار گنجعلی کلی^۳

y.delshad@uok.ac.ir دانشگاه کردستان، v.delshad@uok.ac.ir
 دانشجو، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، k.azizi@uok.ac.ir
 ۲ و *- دانشیار ، شیمی فیزیک ، گروه شیمی، دانشکده انرژی، دانشگاه پلی تکنیک تورین، m.ganjalikoli1360@gmail.com

واژگان كليدى: مليتين، MDP1، شبيه سازى ديناميك مولكولى

۱– مقدمه

ملیتین یک پپتید حاصل از نیش زنبور عسل است که تا به امروز تحقیقات زیادی به صورت تجربی و محاسباتی روی آن انجام شده است[۱]. اگر چه شواهد مثبتی از قابلیت کاربرد این پپتید برای درمان بسیاری از بیماری ها از جمله سرطان و دیابت و عفونت های باکتریایی گزارش شده[۲و۳]، اما مصرف آن به عنوان دارو همواره عوارض جانبی به همراه داشته است. بررسی ها نشان داده که این پپتید می تواند اثرات سمی بر روی گلبول های قرمز و سلول های سالم بدن داشته باشد[۴]. به منظور بر طرف ساختن این مشکل باقری و همکاران در صدد اصلاح آن برآمده و پپتید IMDP1 را طراحی نمودند. این اصلاح شامل حذف دو آمینو اسید آبگریز و یک آمینواسید آبدوست از مجموع ۲۶ آمینو اسید ملتین است. نتایج تجربی نشان داده که ساختار اصلاح شده با وجود خاصیت ضدباکتریایی قویتر ۲۵۲ بار از ملیتین سمیت کمتری دارد. با این وجود این نتایج قادر به مشخص ساختن علت خواص مشاهده شده نیستند [۵]. بر این اساس در تحقیق حاضر محاسبات دینامیک مولکولی به منظور بررسی جزئیات

۲- روش

شبیه سازی های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم افزار گرومکس ۲۰۲۲ به مدت ۲۰۰ نانو ثانیه برای دو سیستم انجام شد که عبارتند از: سیستم اول شامل یک مولکول ملیتین در آب و غلظت ۰/۱۵ مولار از نمک سدیم کلراید و سیستم دوم شامل یک مولکول MDP1 در محیط آب با همان غلظت از نمک. شبیه سازی ها با استفاده از میدان نیروی Charmm36m و مدل آب TIP3P ،در دمای ۳۱۰/۱۵ کلوین و تنظیمات دمایی و فشار به ترتیب با استفاده از ترموستات نوزهوور و باروستات پارینلو-رحمان انجام شدند.



۳- نتايج و بحث

ساختار ثانویه و مربع میانگین جابجایی های دو پپتید در آب اندازه گیری شد. نتایج موجود در جدول (۱) نشان می دهد که ساختار غالب برای هردو پپتید مارپیچ آلفا می باشد که سهم آن در ملیتین ۵۰ درصد و در MDP1 برابر ۴۵ درصد است.

جدول ۱: ساختار ثانویه پپتیدها (درصد)

نوع پپتيد	coil	Bend	Turn	α-Helix	3-Helix
مليتين	۳۱	٩	٩	۵۰	١
MDP1	۳۵	٩	٩	40	٢

میانگین مربع جابجایی ها طبق شکل ۱ برای ملیتین بیشتر از MDP1 و ضریب نفوذ بیشتری داشت. محاسبات پیوند هیدروژنی نشان می دهد که تعداد پیوندهای هیدروژنی ملیتین با آب ۶۵ و با MDP1 برابر۵۷ است.



شکل ۱: میانگین مربع جابجایی ها

۴–نتیجه گیری

ملیتین و MDP1 از نظر سمیت و اثر درمانی اختلاف قابل ملاحظه ای دارند این در حالی است که از نظر ساختاری شباهت زیادی با هم دارند. بنابراین، برای دیدگاه وسیع تر در حوزه طراحی دارو بهتر است مطالعات مولکولی ژرف تر در این زمینه صورت گیرد.

منابع و مراجع

 Memariani, H., Memariani, M., Shahidi-Dadras, M., Nasiri, S., Akhavan, M. M., & Moravvej, H. (2019). Melittin: from honeybees to superbugs. *Applied microbiology and biotechnology*, *103*, 3265-3276.
 Duffy, C., Sorolla, A., Wang, E., Golden, E., Woodward, E., Davern, K., ... & Blancafort, P. (2020). Honeybee venom and melittin suppress growth factor receptor activation in HER2-enriched and triple-negative breast cancer. *NPJ precision oncology*, *4*(1), 24



Guha, S., Ferrie, R. P., Ghimire, J., Ventura, C. R., Wu, E., Sun, L., ... & Wimley, W. C. (2021). Applications and evolution of melittin, the quintessential membrane active peptide. *Biochemical pharmacology*, *193*, 114769.
 Seo, M. D., Won, H. S., Kim, J. H., Mishig-Ochir, T., & Lee, B. J. (2012). Antimicrobial peptides for therapeutic applications: a review. *Molecules*, *17*(10), 12276-12286.

5) Akbari, R., Hakemi Vala, M., Hashemi, A., Aghazadeh, H., Sabatier, J. M., & Pooshang Bagheri, K. (2018). Action mechanism of melittin-derived antimicrobial peptides, MDP1 and MDP2, de novo designed against multidrug resistant bacteria. *Amino acids*, *50*, 1231-1243.



مطالعهی دینامیک مولکولی و مدلسازی برای جلوگیری از انباشتگی پروتئین تاو به کمک مهارکننده در بیماری آلزایمر

نسرين دلفان (و*، سيف اله جليلي ، آتنا پاکزاديان

۱ و ۱- کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و خواجه نصیرالدین طوسی، رایانامه (n.delfan@email.kntu.ac.ir) ۲- استادتمام، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و خواجه نصیرالدین طوسی، رایانامه (sjalili@kntu.ac.ir) ۳-دانشجوی پسادکتری، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و خواجه نصیرالدین طوسی، رایانامه (a.pakzadiyan@email.kntu.ac.ir)

واژگان كليدى: بيمارى ألزايمر، پروتئين تاو، شبيەسازى ديناميك مولكولى، مهاركنندە، دارو

۱– مقدمه

تجمع پروتئینهای اشتباه تاخورده باعث بروز بیماریهای مخرب سیستم عصبی رایج مانند بیماری آلزایمر میشود. در بیماری آلزایمر، نورونها بهدلیل تجمع پلاکهای خارج سلولی حاوی آمیلوئیدبتا و درهمتنیدگیهای فیبریلاری درون سلولی حاوی تاو به آرامی تخریب میشوند و عملکرد خود را از دست میدهند (۱). تاو یک پروتئین مرتبط با میکروتوبول است که ۳۵۲ تا ۴۴۱ آمینواسید دارد و دارای خصوصیت آب دوستی میباشد. پروتئین تاو نقش مهمی در حفظ شکل نورون، زنده ماندن سلول عصبی و همچنین تنظیم پایداری میکروتوبول ایفا میکند. پروتئین تاوی که کار کرد خود را در تثبیت کردن میکروتوبولها از دست دادهاند، عامل اصلی بیماریهای مرتبط با زوال عقل مانند آلزایمر هستند. علت دقیق این بیماری هنوز بهطور کامل شناخته نشده، اما تجمع پروتئینهای آمیلوئیدبتا و تاو بهعنوان دو ویژگی کلیدی آن شناخته شده و بر عملکرد شناختی تأثیر منفی باشند تا از پیشرفت این بیماری های مؤثر در درمان آلزایمر، مولکولهای دارویی باید توانایی مهار هم زمان هر دو پروتئین را داشته باشند تا از پیشرفت این بیماری جلوگیری کنند. در مطالعات گذشته، طراحی ترکیبات جدید مبتنیبر تیوفن با اعمال تغییرات ساختاری هدفمند در بخشهای مختلف مولکول اصلی انجام شد تا به تعادلی بهینه میان بازدارندگی تجمع آمیلوئیدبتا و تاو باشند تا از پیشرفت این بیماری جلوگیری کنند. در مطالعات گذشته، طراحی ترکیبات جدید مبتنیبر تیوفن با اعمال تغییرات ساختاری هدفمند در بخشهای مختلف مولکول اصلی انجام شد تا به تعادلی بهینه میان بازدارندگی تجمع آمیلوئیدبتا و تاو بازدارندگی مؤثری دو برابر پروتئین تاو، بهعنوان یکی از عوامل کلیدی در ایجاد بیماری آلزایمر، نشان دادهاست که میتواند به بازدارندگی مؤثری در برای بیماری آلزایمر کمک کند.

۲- روش

تمامی شبیهسازیهای دینامیک مولکولی با استفاده از نرمافزار گرومکس نسخه ۲۰۲۲۳ صورت گرفت. ابتدا ساختار اولیه پروتئین و لیگاند در یک جعبه شبیهسازی با ابعاد ۱۲×۱۵×۱۰ نانومتر قرار داده شد . برای همه سیستم ها از میدان نیروی Charmm36 و برای حلال آب از مدل TIP3P استفاده شد. برای مدلسازی برهم کنشهای برد بلند، از روش PME استفاده شد و شرایط مرزی متناوب در تمام جهات رعایت گردید. تمام شبیهسازیها در این پژوهش در ۱۰۰ نانوثانیه انجام شده است.

۳– بحث

برای بهدست آوردن ساختار اولیه، با جستجو در بانک اطلاعاتی پروتئین، کد پروتئینی 203L و از میان ترکیبات آلی مبتنی بر تیوفن، ترکیب ۷ بهعنوان مهارکننده انتخاب شد (۴). مطابق شکل ۱ سمت راست، تغییرات برای پروتئین و مهارکنندهی ۷ مورد بررسی قرار گرفت. همانطور که مشاهده میشود، با افزایش زمان نمودار مربوط به پروتئین به حالت پایداری رسیده و تغییرات قابل توجهی در آن دیده نمیشود که نشاندهنده پایداری ساختاری پروتئین در طول شبیهسازی است. با این حال، نمودار مربوط به مهارکننده ۷ نوسانات قابل توجهی نشان میدهد که این افتوخیزهای شدید در نمودار بیانگر این است که با افزوده شدن مهارکننده ۷ نوسانات قابل توجهی نشان میدهد که این افتوخیزهای شدید در نمودار بیانگر این است که با ساختاری ایجاد شده در محل اتصال پروتئین، ناپایداری ساختاری در سیستم ایجاد شده است. این ناپایداری میتواند به دلیل تغییرات ساختاری ایجاد شده در محل اتصال پروتئین با مهارکننده باشد. علاوه براین، در شکل ۱ سمت چپ مشاهده می کنید که میزان افتوخیز در پروتئین با گذشت زمان در حال افزایش است. این موضوع نشاندهنده افزایش انعطاف پذیری و نوسانات ساختاری پروتئین در طول شبیه سازی است. از سوی دیگر، نمودار مربوط به مهارکنندههای ۷ به تدریج در حال کاهش است، که بیانگر



شكل ۱: سمت راست نمودار تغييرات RMSD، سمت چپ نمودار تغييرات RMSF

۴- نتیجهگیری

در این پژوهش، نتایج شبیهسازی دینامیک مولکولی بهعنوان تأییدی برای دادههای تجربی مورد استفاده قرار گرفتند. شبیهسازیها نشان دادند که لیگاند بهطور پایدار در جایگاه فعال پروتئین باقی میماند. علاوه بر این، پروتئین در حضور لیگاند ساختار پایداری را حفظ میکند و هیچ تغییر ساختاری عمدهای در طول زمان مشاهده نشد. این یافتهها نهتنها نشاندهنده موفقیتآمیز بودن اتصال لیگاند به پروتئین هستند، بلکه بر توانایی لیگاند برای مهار فعالیت پروتئین نیز تأکید دارند.



منابع و مراجع

[1] D. Malafaia, H. M. T. Albuquerque, and A. M. S. Silva (2021). Amyloid-β and tau aggregation dual-inhibitors: A synthetic and structure-activity relationship focused review. Eur. J. Med. Chem., vol. 214, p. 113209.
[2] V. H. Man, X. He, J. Gao, and J. Wang (2023). Phosphorylation of Tau R2 Repeat Destabilizes Its Binding to Microtubules: A Molecular Dynamics Simulation Study. ACS Chem. Neurosci., vol. 14, no. 3, pp. 458–467.
[3] N. Job, V. S. Thimmakondu, and K. Thirumoorthy (2023). In Silico Drug Design and Analysis of Dual Amyloid-Beta and Tau Protein-Aggregation Inhibitors for Alzheimer's Disease Treatment. Molecules, vol. 28, no. 3, p. 1388.

[4] S. Fuse, K. Matsumura, Y. Fujita, H. Sugimoto, and T. Takahashi (2014). Development of dual targeting inhibitors against aggregations of amyloid- β and tau protein. Eur. J. Med. Chem., vol. 85, pp. 228–234.



واژگان کلیدی: آبسزیک اسید، داکینگ مولکولی، شبیهسازی دینامیک مولکولی، مکانیک مولکولی پواسون-بولتزمن

۱– مقدمه

آبسزیک اسید (ABA) یک هورمون گیاهی است که نقشهای متعددی در فرآیندهای فیزیولوژیکی گیاهان ایفا میکند. ABA بهطور طبیعی در بافتهای مختلف پستانداران نیز تولید میشود. ABA نقش مهمی در فرآیندهای متابولیک اساسی بدن انسان، از جمله تنظیم هموستاز گلوکز، پاسخهای ایمنی، عملکرد سیستم قلبیعروقی، و تنظیم التهاب دارد [۱]. با وجود اهمیت شناختهشده ABA در این فرآیندها، مکانیسمهای دقیق عملکرد آن تا حد زیادی ناشناخته باقی مانده است. درک عمیقتر این مکانیسمها نه تنها میتواند به شناسایی کاربردهای جدید ABA در درمان بیماریها کمک کند، بلکه میتواند به بهینهسازی استفاده از این هورمون و کاهش عوارض جانبی آن منجر شود. با توجه به هزینه و زمان صرف شده برای جستجوی اهداف دارویی، غربالگری تمام مولکولهای احتمالی مورد هدف داروها در آزمایشگاه امکانپذیر نیست. تحت این شرایط، برخی از رویکردهای محاسباتی برای شناسایی یا پیشبینی اهداف احتمالی ABA

۲- روش

در این مطالعه، از چندین پایگاه داده آنلاین معتبر از جمله Swiss Target ، Super Pred ، Target Net ، SEA ، Swiss Target و جمله عتبر از جمله PASS برای شده تحت مطالعات داکینگ مولکولی با استفاده از نرم افزار PASS برای شناسایی اهداف بالقوه استفاده شد. ترکیبات شناسایی شده تحت مطالعات داکینگ مولکولی با استفاده از نرم افزار MD (MD) برای کمپلکسهایی که امتیاز بالای اتصال به مقادیر پیشفرض تنظیم شدند. سپس شبیه سازی های دینامیک مولکولی (MD) برای کمپلکسهایی که امتیاز بالای اتصال به مقادیر پیشفرض تنظیم شدند. سپس شبیه سازی های دینامیک مولکولی (MD) برای کمپلکسهایی که امتیاز بالای اتصال داشتند، با استفاده از نرمافزار گرومکس نسخه ۲۰۲۰۴ (MD) و میدان نیزوی چارم ۳۶ انجام شد. پس زمین ای ۲۰۰۰ گام با استفاده از روش نزول تندترین شیب، سیستمها [۳] و میدان نیروی چارم ۳۶ انجام شد. پس از کمینه سازی انرژی با ۵۰۰۰ گام با استفاده از روش نزول تندترین شیب، سیستمها تحت تعادل سازی TVT و NVT و NT برای می در نیزوی اندژی با ۱۳۰۰ گام با استفاده از از روش نزول تندترین شیب، سیستمها MD تحت تعادل سازی Trace از روش نزول تندترین شیب، سیستمها رو MD بازی Trace مولکولی (MD و MS و MI) برای می مولکولی (MD و MS و MI) برای که مینه MI و MI) با ستفاده از انتگرال گیری NVT و آنوا تندترین شیب، سیستمها مولی تعادل سازی Targe و MI برای ۲۰۰۰۵ گام با استفاده از انتگرال گیری Icap-frog قرار گرفتند. در نهایت، اجرای MD تولید به مدت ۲۰۰ انوثانیه با گام زمانی ۲ فمتوثانیه اجرا شد. سپس، انرژیهای آزاد اتصال کمپلکسهای شیه سازی شده با استفاده از روش مکانیک مولکولی پواسون -بولتزمن (MD) تعیین شدند[۴].



۳- بحث و نتیجه گیری

اهداف احتمالی ABA با استفاده از سرورهای آنلاین پیشبینی شدند. در مجموع، ۶۴ هدف شناسایی شد که پس از حذف موارد تکراری و اهداف فاقد ساختار سهبعدی، به عنوان اهداف بالقوه ABA مورد ارزیابی قرار گرفتند. از این میان، ۱۳ گیرنده موارد تکراری و اهداف فاقد ساختار سهبعدی، به عنوان اهداف بالقوه ABA مورد ارزیابی قرار گرفتند. از این میان، ۱۳ گیرنده با توجه به انرژی اتصال پایین یا میل اتصال بالای آنها (میل اتصال ≤ ۳۰- کیلوژول بر مول) انتخاب شده و تحت تحلیلهای شیه سازی MD قرار گرفتند. از این میان، ۱۳ گیرنده با توجه به انرژی اتصال پایین یا میل اتصال بالای آنها (میل اتصال ≤ ۳۰- کیلوژول بر مول) انتخاب شده و تحت تحلیلهای شیه MD قرار گرفتند. پایداری این سیستمها با محاسبات ISQN ، Rg، RMSF ، RMSD و SASA و تحلیل المای آنها (میل AMM الحال و مالا مالای داد که گیرندههای 20X9 ، 40D موالا ، 40P در مقایسه با سایر گیرندهها، مقادیر متوسط کمتری در این پارامترها داشتهاند، که بیانگر پایداری بالاتر این گیرندهها است. علاوه بر این، تجزیه و تحلیل MMM رزیابی شد. نتایج نشان داد که گیرندههای 20X9 ، 40D ، 1974 ، 20X9 و ISQN ، 40P در مقایسه با سایر گیرندهها، مقادیر متوسط کمتری در این پارامترها داشتهاند، که بیانگر پایداری بالاتر این گیرندهها است. علاوه بر این، تجزیه و تحلیل MMM متوسط کمتری در این پارامترها داشتهاند، که بیانگر پایداری بالاتر این گیرندهها است. علاوه بر این، تجزیه و تحلیل MMM متوسط کمتری نرژی اتصال نسبت به سایر گیرندهها دارند و بنابراین این گیرنده ها می توانند به طور محکمتری به ABA متصل شوند. این مشاهده با نتایج حاصل از تجزیه و تحلیل MM همخوانی این گیرنده ها ما با موفقیت چهار گیرنده مهم سیگنال دهی ABA (گیرنده آندروژن، گیرنده گلوکوکورتیکوئید، گیرنده بین دارد. مطالعه ما با موفقیت چهار گیرنده مهم سیگنال دهی ABA (گیرنده آندروژن، گیرنده گلوکوکورتیکوئید، گیرنده و از نظر دارد. مطالعه ما با موفقیت چهار گینده مهم سیگنال دهی ABA (گیرنده آندروژن، گیرنده گلوکوکورتیکوئید، گیرنده و از نظر دارد. و از نظر مینرالوکورتیکوئید، و گیرنده بتا اسید رتینوئیک) را مشخص کرد که میل ترکیبی قوی برای اتصال با ABA دارند و از نظر مینرالوکورتیکوئید، و گیرنده بتا اسید رتینوئیک) را مشخص کرد که میل ترکیبی قوی برای ایمال با محال دارند و از نظر میزالوکورتیکوئید، و گیرنده بتا ایداد



شکل ۱: مشارکت انرژی آزاد اتصال (کیلوژول بر مول) آبسزیک اسید با گیرنده شناسایی شده.

منابع و مراجع

[1] Li, H. H., Hao, R. L., Wu, S. S., Guo, P. C., Chen, C. J., Pan, L. P., & Ni, H. (2011). Occurrence, function and potential medicinal applications of the phytohormone abscisic acid in animals and humans. Biochemical pharmacology, 82(7), 701-712.

[2] Morris, G. M., Goodsell, D. S., Halliday, R. S., Huey, R., Hart, W. E., Belew, R. K., & Olson, A. J. (1998). Automated docking using a Lamarckian genetic algorithm and an empirical binding free energy function. Journal of computational chemistry, 19(14), 1639-1662.

[3] Abraham, M. J., Murtola, T., Schulz, R., Páll, S., Smith, J. C., Hess, B., & Lindahl, E. (2015). GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers. SoftwareX, 1, 19-25.

[4] Kumari, R., Kumar, R., Open Source Drug Discovery Consortium, & Lynn, A. (**2014**). g_mmpbsa GROMACS tool for high-throughput MM-PBSA calculations. Journal of chemical information and modeling, 54(7), 1951-1962.

[5] Iranmanesh, Z., Dehestani, M., & Esmaeili-Mahani, S. (**2024**). Discovering novel targets of abscisic acid using computational approaches. Computational Biology and Chemistry, 112, 108157.

مطالعه سطح انرژی پتانسیل بین مولکولی برای کربن دواتمی و گاز نئون

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

محمدمهدی دهشیری'، محمدرضا نوربالا^{۲و®}، منصور نمازیان^۳

۱- دانشجو کارشناسی ارشد، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه یزد dehshiri76@gmail.com ۲ و ۱۰- نویسنده مسئول : دانشیار ، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه یزد noorbala@yazd.ac.ir ۲- : استاد، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه یزد ۳

واژگان کلیدی: سطح انرژی پتانسیل بینمولکولی، کربن دواتمی، نئون، خطای برهمنهی مجموعه پایه

۱–مقدمه

تاکنون گونههای شیمیایی بسیاری در محیطهای میانستارهای شناسایی شدهاند. با کشف مولکولهای بیشتر، درک ما از شیمی این مولکولها، بهویژه آنهایی که فراتر از مرزهای شیمی متعارف هستند،گسترش مییابد. یکی از این مولکولها در اخترشیمی، مولکول دواتمی کربن (C2) است. نخستین بار، این مولکول در سال ۱۹۷۷ توسط سوزا و لوتز از طریق مشاهده خطوط جذبی شناسایی شد (C2) است. نخستین بار، این مولکول در سال ۱۹۷۷ توسط سوزا و لوتز از طریق مشاهده خطوط جذبی شناسایی شد (C2) است. نخستین بار، این مولکول در سال ۱۹۷۷ توسط سوزا و لوتز از طریق مشاهده خطوط جذبی شناسایی شد (C2) است. نخستین بار، این مولکول در سال ۱۹۷۷ توسط سوزا و لوتز از طریق مشاهده خطوط جذبی شناسایی شد (C2) است. نخستین بار، این مولکول در سال ۱۹۷۷ توسط سوزا و لوتز از طریق مشاهده دنبالهدارها، جوهای ستارهای و ابرهای میانستارهای گزارش شده و مطالعات متعددی بر روی آن انجام گرفته است (Hamano 2019). پس از آن، حضورش به فراوانی در محیطهای خارج از زمین، مانند (call باعد و ایرهای میانستارهای گزارش شده و مطالعات متعددی بر روی آن انجام گرفته است (interpret 4 الم 2019). پس از آن، حضورش به فراوانی در محیطهای خارج از زمین، مانند (call باله دارها، جوهای ستارهای و ابرهای میانستارهای گزارش شده و مطالعات متعددی بر روی آن انجام گرفته است (interpret 4 این 2019). و ایر می کنون انرژی پتانسیل (et al., 2019) مولکول ها بسیار حائز اهمیت است زیرا این سطوح بیانگر تغییرات انرژی ناشی از نزدیک شدن و برهم کنش بین مولکول ها هستند. تحلیل این سطوح به فهم بهتر نیروهای بینمولکولی کمک می کند و می تواند باعث پیشرفتهای مهمی در زمینههای فیزیکی و شیمیایی شود. سطوح انرژی پتانسیل نقش کلیدی در محاسبات می کندی کوانتومی و کلاسیکی ایفا می کنند (gunna & Hua-Gen, 2000; Najar et al., 2008).

۲-روش پژوهش

در سال ۱۹۹۷، ناومکین و مککورت به بررسی سطح انرژی پتانسیل بین گاز نجیب آرگون و C2 پرداختند. آنها از مجموعه پایه aug-cc-pVTZ استفاده کردند. نتایج به دست آمده با مدل لنارد-جونز مقایسه شد و مشخص شد به خوبی با دادهها مطابقت ندارد. آنها پیشبینی کردند که پتانسیل برهمکنش دارای یک چاه تقریباً کروی است که عمیق ترین نقطه آن در نزدیکی دو انتهای مولکول C2 قرار دارد (Naumkin & McCourt, 1997). در این پژوهش اسکن و محاسبه انرژی سامانه شامل گاز نئون و مولکول کربن دواتمی با استفاده از روش (t) کی و مجموعه پایه aug-cc-pVTZ و همچنین با درنظر گرفتن خطای برهمنهی مجموعه پایه (BSSE) صورت گرفته است. اسکن فاصله بین مرکز جرم مولکول C2 و گاز نئون برای فاصلههای ۲ تا ۴ آنگسترم با قدمهای ۱/۱ آنگسترمی و برای فاصلههای ۴ تا ۶ آنگسترم با قدمهای ۲/۱ آنگسترمی و برای فاصلههای ۶ تا ۴ آنگسترم با قدمهای ۵/۱ آنگسترمی صورت گرفته است. اسکن فاصله بین مرکز جرم مولکول 22 و گاز نئون برای فاصلههای ۶ تا ۴ آنگسترم با قدمهای ۱/۱ آنگسترمی و برای فاصلههای ۴ تا ۶ آنگسترم با قدمهای ۲/۱ آنگسترمی و برای فاصلههای ۶ تا ۴ آنگسترو با قدمهای در با آنگسترمی می سورت گرفت. همچنین با توجه به تقارن سامانه، محاسبات برای زوایای ۰ تا ۹۰ درجه با قدمهای ۲ درجهای انجام شده است. سپس داده های موجود در خروجی برنامه گوسین ۱۶ با استفاده از اکسل، زبان برنامه نویسی پایتون و کرابخانههای نام پای، پانداس و متپلات استخراج شده و مورد تحلیل و بررسی قرار گرفته است.



۳-بحث و نتيجه گيري

نتایج محاسبات با درنظر گرفتن BSSE نشان میدهد که برهمکنش مولکولهای C₂ به نسبت ضعیف بوده و بیشترین برهمکنش برای زاویههای صفر و ۱۸۰ درجه و برابر با ^۲-۳۹/۳ cm⁻¹ است و ضعیفترین برهمکنش مربوط به زاویه ۹۰ درجه و ۲۹/۸ cm⁻¹ است. لازم به ذکر است بدون در نظر گرفتن BSSE برای زاویه صفر و ۱۸۰ درجه مقدار انرژی برهمکنش اصلاحنشده ۸۱/۲ cm⁻¹ و برای زاویه ۹۰ درجه ۲۰-۵۶/۵ cm





منابع و مراجع

[1] Gunnar, N., & Hua-Gen, Y. (2000). Quantum theory of bimolecular chemical reactions. *Reports on Progress in Physics*, 63(7), 1001. https://doi.org/10.1088/0034-4885/63/7/201

[2] Hamano, S., Kawakita, H., Kobayashi, N., Takenaka, K., Ikeda, Y., Matsunaga, N., Kondo, S., Sameshima, H., Fukue, K., & Yasui, C. (2019). First detection of A–X (0, 0) bands of interstellar C2 and CN. *The Astrophysical Journal*, *881*(2), 143.

[3] Najar, F., Abdallah, D. B., Jaidane, N., & Lakhdar, Z. B. (2008). Potential energy surface for the C2 (X1 Σ g+)+ He (1S) system: Application to the rotationally inelastic scattering of C2 in collisions with He. *Chemical physics letters*, 460(1-3), 31-36.

[4] Naumkin, F. Y., & McCourt, F. (1997). A nontypical atom-diatom van der Waals interaction: Ar–C 2. *The Journal of Chemical Physics*, 107(4), 1185-1194.

[5] Souza, S. P., & LUTz, B. L. (1977). Detection of C2 in the interstellar spectrum of Cygnus OB2 number 12/VI Cygni number 12. *Astrophysical Journal, Part 2-Letters to the Editor, vol. 216, Aug. 15, 1977, p. L49-L51., 216,* L49-L51.



مطالعه محاسباتی خواص ساختاری و الکترونی نانوساختار ۸-۱۶-۴ گرافاین خالص و تزئین شده با فلزسدیم و بررسی جذب هیدروژن روی آن

مهتاب دهقانی^۱، عادل رئیسی^{۲و*}

۱ کارشناسی ارشد شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه کاشان ۲ استاد شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک،دانشکده شیمی دانشگاه کاشان areisi@kashanu.ac.ir

واژگان کلیدی: ۸-۱۶-۴ گرافاین، تزئین کردن با فلز، نظریه تابعی اصلاح شده، جذب هیدروژن، نانو ساختار دو بعدی.

۱– مقدمه

هیدروژن به عنوان یک منبع انرژی پاک و با ظرفیت انرژی بالا به عنوان یک نوع سوخت تجدید پذیر معرفی شده است و از ویژگی های مناسبی برخوردار است. نانوساختار های کربنی به عنوان بستری مناسب برای ذخیرهسازی هیدروژن مورد استفاده میباشند. از مزایای این نانوساختار های کربنی میتوان به سینتیک مناسب واکنش رهاسازی هیدروژن، کم خطر بودن، قیمت مناسب و قابلیت اصلاح برای افزایش ظرفیت جذب هیدروژن اشاره کرد. فلزات قلیایی مانند سدیم به دلیل ویژگی های الکترونی منحصربفرد مانند انتقال بار آسان برای افزایش انرژی جذب مولکول هیدروژن روی بسترهای گرافاینی مناسب هستند [۱]. از این رو در این پژوهش با استفاده از روش محاسباتی نظریه تابعی چگالی (DFT)، به بررسی ویژگیهای الکترونی و ساختاری نانوساختار ۸–۱۶–۴ گرافاین خالص و تزئین شده با فلز سدیم و نیز ذخیره سازی مولکول هیدروژن روی آنها پرداخته میشود. درنهایت با بررسی افزایش تعداد مولکولهای هیدروژن روی بستر های طرفیت ذخیره سازی مولکول هیدروژن، تغییرات درصد وزنی و مقدار انرژی جذب آنها بررسی می شده با فلز سدیم، حداکثر ظرفیت ذخیره سازی مولکول هیدروژن، تغییرات درصد وزنی و مقدار انرژی جذب آنها بررسی می شود.

۲- روش محاسبات

کلیه محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی اصلاح شده مرتبه دوم گریم (DFT-D2) و تقریب GGA/PBE و توسط ماژول DNO³ تعبیه شده در نرمافزارمتریال استودیو نسخه ۲۰۱۷ انجام شده است. همچنین مجموعهی پایه به کار رفته DNP میباشد. از ابر سلول ۲×۲ نانوساختار ۸-۱۶-۴ گرافاین استفاده شده و یک فضای خالی به اندازهی ۲۰ آنگستروم در امتداد محور میباشد. از ابر سلول ۲×۲ نانوساختار ۸ ماه ۲۰۰ گرافاین استفاده شده و یک فضای خالی به اندازهی ۲۰ آنگستروم در امتداد محور میباشد. از ابر سلول ۲×۲ نانوساختار ۸ ماه مجاور، در نظر گرفته شده است. مش بندی نقاط k در منطقه اول بریلوئن ۱×۷×۷ و به روش مونخورست-پک در نظر گرفته شده است. مش بندی نقاط k در منطقه اول بریلوئن ۱×۷×۲ و به روش مونخورست-پک در نظر گرفته شده است. مش بندی برابر با ۲/۹ آنگستروم در نظر گرفته شده است. می مواند و به روش مونخورست-پک در نظر گرفته شده است. همچنین فاصله قطع اوربیتالی برابر با ۲/۹ آنگستروم در نظر گرفته شده است. به منظور اعمال تصحیح مرتبه دوم گریم برای در نظر گرفتن و محاسبه نیروهای واندروالسی دوربرد مقدار 60 برای اتم کربن و مولکول هیدروژن به ترتیب برابر با ۲/۹۲ و ۲۰/۱۰ (eV.Å) (mol 1/۴۵۰) و برای اتم فلز سدیم برابر با ۲۰۱۰) و در شار گرفته شده کربن و مولکول هیدروژن به ترتیب برابر با ۶/۹ آن ۲۰/۱۰ و ۲۰/۱۰ (eV.Å) (mol 1/۴۵۰) و برای اتم فلز سدیم برابر با ۲۰۱۶ (eV.Å) (mol 1/۴۵۰) و برای اتم فلز سدیم برابر با ۵/۱۰ (۵/۱۰۰) (eV.Å) (mol 1/۴۵۰) و برای اتم و دو گریم برای تابعی PBE برابر با ۳/۱۰ و ۲۰/۱۰ و ۲۰ و ۲۰/۱۰ و ۲۰/۱۰ و ۲۰/۱۰ و ۲۰/۱۰ و ۲۰/۱۰ و ۲۰/۱۰ و ۲۰/۱۰



۳- بحث و نتیجه گیری

ابر سلول ۲×۲ و جایگاه های جذب نانوساختار ۸−۱۶−۴ گرافاین در شکل ۱⊣لف نشان داده شده است. سلول واحد این ساختار ۱۶ اتم کربن دارد که شامل دو نوع هیبریداسیون sp و sp می باشد. در ابتدا از سلول واحد ساختار ۸–۱۶–۴ گرافاین، ابرسلول ۲×۲ آن را گسترش داده و بهینه می کنیم. نتایج مربوط به نمودار ساختار نواری در شکل ۱-ب نشان می دهد که مقدار پهنای باند آن صفر بوده، خاصیت مغناطیسی ندارد و شامل سه نقطه دیراک در سطح فرمی است که خاصیت رسانایی و شبه فلزی بستر را تایید می کند که با نتایج پژوهش های قبلی در مورد خواص این بستر تطابق دارد [۲]. سپس فلز سدیم در جایگاهها و فواصل مختلف از صفحه قرارداده و ساختارها بهینه شد. نمودار ساختارنواری پایدارترین بستر تزئین شده با فلز سدیم در شکل ۱-ج نشان داده شده و دیده میشود ساختار همچنان خاصیت غیرمغناطیسی و رسانایی خود را حفظ کرده است. در مرحله بعد، یک مولکول هیدروژن در جهات افقی و عمودی روی جایگاه های مختلف جذب و در فواصل مختلف از بسترخالص قرار داده شد و انرژی جذب آن در بهترین حالت O/۱۳۷ eV بدست آمد که با توجه به معیار تعیین شده توسط DOE برای انرژی جذب مطلوب هیدروژن (بین ۰/۲ تا ۲/۴ الکترون ولت) نیاز به ارتقا دارد. در ادامه مولکول هیدروژن در جهات افقی و عمودی روی جایگاه های جذب بستر تزئینشده با فلز سدیم و در فواصل مختلفی از آن قرار داده شده تا تأثیر فلز سدیم بر انرژی جذب مولکول هیدروژن بررسی شود که نتایج نشان می دهد انرژی جذب تا ۰/۴۱۳ eV افزایش می یابد (حدو سه برابر). در نهایت، به منظور ارزیابی حداکثر ظرفیت ذخیره سازی مولکولهای هیدروژن روی پایدارترین بستر تزئینشده با سدیم، تعداد مولکول در هر مرحله افزایش داده شد. حداکثر تعداد مولکول هیدروژن روی بستر تزئین شده با فلز سدیم نه مولکول می باشد (شکل ۱-و). انرژی جذب آخرین هیدروژن روی بستر برابر با eV ۱۲۲ وی باشد بنابراین فرایند افزایش مولکول هیدروژن متوقف شد. درصد وزنی مولکول هیدروژن در این حالت ٪۷/۲۴ و انرژی جذب میانگین برابر با v/۱۹۸ eV- است نتایج نشان می دهد تزئین بستر ۸-۱۶-۴ گرافاین باعث ارتقای انرژی جذب مولکولهای هیدروژن تا حدود سه برابر می شود.



شکل ۱: الف) جایگاه های جذب ساختار ۸–۱۶–۴ گرافاین ب) نمودار ساختارنواری ساختار بهینه شده ۸–۱۶–۴ گرافاین ج) نمودار ساختارنواری پایدارترین ساختار بستر تزیئن شده با فلز سدیم، د) وضعیت قرارگیری افزایش تعداد مولکول های هیدروژن روی بستر تزئین شده با فلز سدیم



منابع و مراجع

- [1] Tromer, R. M., Pereira Júnior, M. L., L. Lima, K. A., Fonseca, A. F., da Silva, L. R., Galvao, D. S., & Ribeiro Junior, L. A. (2023). Mechanical, electronic, and optical properties of 8-16-4 graphyne: A 2d carbon allotrope with dirac cones. *The Journal of Physical Chemistry C*, 127(25), 12226-12234.
- [2] Bandyopadhyay, A., Majumdar, A., Chowdhury, S., Ahuja, R., & Jana, D. (2021). 8-16-4 graphyne: Squarelattice two-dimensional nodal line semimetal with a nontrivial topological Zak index. *Physical Review B*, 103(7), 075137.



انتقال الكترون تك لايههاى خودسازمان يافته عاملدار شده با فروسن كربو كسالدهيد

الهه دهناری^۱ ، داوود طاهرینیا^{۲ ،*}

۱ - دانشجوی دکتری، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی و دانشگاه صنعتی شریف، (elahe_dehnari@yahoo.com) ۲ و * - استادیار، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی و دانشگاه صنعتی شریف، (taherinia@sharif.edu)

واژگان كليدى: تكلايه هاى خود سامان يافته، فروسنكربوكسالدهيد، ولتامترى چرخهاى، سرعت انتقال الكترون

۱– مقدمه

انتقال الکترون (ET) در مرز الکترود/مولکول به دلیل نقش محوری آن در بسیاری از فناوریها به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته است. یک بستر مناسب برای بررسی فرآیندهای انتقال الکترون سطحی، گونههای الکتروفعال هستند که در یک تک لایه خود سازمانیافته (SAM) تعبیه شدهاند [۱]. سرعت انتقال الکترون در MARهای فعال الکتروشیمیایی به پارامترهای مختلفی از جمله جفت شدگی بین دهنده، پل و پذیرنده، سطوح انرژی الکترونیکی، ترکیب شیمیایی و ساختار مولکولی پل، طول پل، دما و ماهیت الکترولیت بستگی دارد [۲]. سیمهای مولکولی توسط واکنشهای تراکم ایمینی بین گروه های آمینی (NH2) و گروههای عاملی آلدهیدی (CHO) در روی سطح الکترود رشد میکنند [۳]. در این مطالعه اثر دمای الکترولیت بر سرعت انتقال الکترون در ساختار تک لایههای مولکولی تشیه بر سطح الکترود رشد می مند و FTO

۲- روش

در این کار، مطابق با شماتیک نشان داده شده در شکل ۱، ابتدا سطح الکترود FTO با گروههای آمینوپروپیل تری متوکسی-سیلان (APTMS) اصلاح شد. سپس، در مرحله بعد لایههای خودسازمان یافته الکتروفعال شده با فروسن کربوکسالدهید (FcCHO)توسط واکنش تراکم ایمینی بر سطح الکترود تثبیت شد. الکترود اصلاح شده در یک سلول الکتروشیمیایی سه الکترودی حاوی الکترولیت NBu₄PF₆ قرار گرفتند. مقادیر پوشیدگی سطحی فروسن (_FcC) و سرعت انتقال الکترون در الکترودهای پوشیده شده با ساختارهای لایهای در دماهای مختلف الکترولیت با استفاده از ولتامتری چرخهای مورد مطالعه قرار گرفت.



شكل ١: شماتيك اصلاح سطح الكترود FTO توسط تك لايه هاي خود سازمان يافته ختم شده به FcCHO



۳- بحث

اندازه گیری CV برای بررسی سرعت ET و تعیین F_Fc برای FTO اصلاح شده با SAM ختم شده به Fc در حضور الکترولیت در دماهای مختلف انجام شد. شکل زیر ولتاموگرامهای مربوطه را در دماهای ۵، ۱۵، ۲۵ و ۳۵ درجه سانتی گراد در سرعت روبش پتانسیل ۵۰۰ میلیولت بر ثانیه را نشان میدهد. براساس نتایج بدست آمده با افزایش دما اختلاف پتانسیل پیک کاهش یافته و سینتیک انتقال الکترون بیشتر میشود.



شکل ۲: ولتاموگرام های چرخهای تک لایه خاتمه یافته با (FcCHO) (۲۰ mM) روی سطح الکترود FTO با سرعت رفت و برگشت (s00(mV/s) درالکترولیت 0.1 M) NBu4PF6 / CH3CN با دماهای مختلف

نتایج به دست آمده اختلاف پتانسیل پیک (ΔE_P)، مقادیر Γ_{Fc} ، و همچنین ثابت سرعت ET برای الکترود اصلاح شده مورد نظر در جدول زیر لیست شده است. همانطور که دیده می شود با کاهش دما مقادیر ΔE_P افزایش و مقادیر ثابت ET کاهش می ابد. مقادیر Γ_{Fc} در دماهای کمتر به دلیل کاهش تورفتگی لایه او در دسترس پذیری بیشتر گروه های فروسن نیز افزایش یافته است.

Temperature(⁰ C)	$\Gamma_{\rm Fc}$ (molecules/nm ²)	$\Delta E_P(mV)$	$k^{0}_{\rm ET}({\rm s}^{-1})$	
۳۵	٧.۴٧	144	7.54	
۲۵	٨.٨٧	۱۵۳	7.44	
۱۵	۹.۷۱	١٧۴	١.٧٨	
۵	۲۳. ۲۱	۱۹۵	1.47	

جدول ۱ : مقدار اختلاف پیک کاتدی و آندی و پوشیدگی سطحی در تکلایههای خاتمه یافته با 20mM (FcCHO) روی سطح الکترود FTO با سرعت رفت وبرگشت (mV/s) 500(mV/s) در الکترولیت 0.1 M NBu4PF6/ CH3CN با دماهای مختلف

۴–نتیجه گیری

بر اساس اندازه گیری های الکتروشیمیایی، مشخص شد که در الکترودهای اصلاح شده با تک لایه های خودسازمان یافته الکتروفعال، با افزایش دمای الکترولیت، سرعت انتقال الکترون افزایش مییابد ولی مقادیر پوشش سطحی گروه های فروسن روی سطح کاهش می یابد.

منابع و مراجع

[1] Taherinia, D. (**2020**). Investigation of the Interfacial Electron Transfer Kinetics in Ferrocene-Terminated Oligophenyleneimine Self-Assembled Monolayers. Langmuir, 36, 12572–12579.

[2]. Gooding, J. J., and Ciampi, S. (**2011**). The Molecular Level Modification of Surfaces: From Self-Assembled Monolayers to Complex Molecular Assemblies. Chemical Society Reviews, 40, 2704–2718.

[3] Choi, S. H., and Frisbie, C. D. (**2010**) Enhanced Hopping Conductivity in Low Band Gap Donor–Acceptor Molecular Wires Up to 20 Nm in Length. Journal of American Chemical Society, 132, 16191–16201.



مطالعه مهارکنندههای (پیم۳) کیناز به عنوان عامل ضد سرطان با استفاده از کیوسار

سه بعدی

ماریه دهواری ^{٬٬}٬ علی ابراهیمی ^۲

۱ - دانشجو ، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، (mariyadehvari@gmail.com) ۲- استاد، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، رایانامه (ebrahimi@chem.usb.ac.ir)

واژگان کلیدی: مهارکنندههای ضدسرطان، طراحی محاسباتی دارو، کاتیون، کیوسار سه بعدی.

۱– مقدمه

سرطان یک اصطلاح عمومی برای یک گروه بزرگ از بیماریهایی است که میتواند بر هر قسمت از بدن تاثیر بگذارد. از دلایل اصلی ایجاد سرطان جهشهای ایجاد شده در کینازها و در نتیجه عملکرد نادرست آنها در سیستم انتقال پیام درون سلولی میباشد و به همین دلیل توسعه و تولید مهارکنندههای کیناز بحث داغ محافل تحقیقات دارویی جهت تولید داروهای ضد سرطان شده است. کینازهای پیم (محل درج پروویروسی برای ویروس لنفومی موش مولونی) خانوادهای از سه کیناز پروتئین سرین/ترئونین انکوژنیک فعال و مرتبط با عملکردی هستند که توسط ژنهای (I-PIM-1, PIM-2, PIM-3)، کدگذاری میشوند [۱]. ایندول یک ترکیب آروماتیک است و ساختاری دو حلقهای دارد که از یک حلقه بنزن شش ضلعی به یک حلقه پیرول پنچ عضوی متصل شده است. ایندول به طور گسترده در محیط طبیعی توزیع میشود و میتواند توسط باکتریهای مختلف تولید شود [۲]. مدل حاصل از تحلیل رابطه کمّی ساختار-فعالیت سه بعدی، RSAP-QSAR، می تواند به شناسایی تمام ویژگیهایی که مولکولهای زیست فعال جدید، به طور سیستماتیک با استفاده RSAP-QSAR، می تواند به شناسایی تمام ویژگیهایی که مولکولهای زیست فعال جدید، به طور سیستماتیک با استفاده RSAP-QSAR برای بررسی تأثیر ویژگیهای ساختاری بر فعالیت مولکولهای زیست فعال جدید، به طور سیستماتیک با استفاده RAP-QSAR می تواند به شناسایی مام ویژگیهایی که مولکولهای زیست فعال جدید، به طور سیستماتیک با استفاده RAP-QSAR برای بررسی تأثیر ویژگیهای ساختاری بر فعالیت بازدارنده مورد مطالعه قرار گرفتهاند. مدلهای آنالیز میدان مولکولی مقایسهای و شاخصهای شاهت مولکولی مقایسهای (CoMFA و COMFA) همبستگی خوبی بین فعالیتهای پیش بینی شده و تجربی نشان میدهند و ارزش آماری

۲- روش

در این کار از یک مجموعه داده مربوط به ۳۵ ترکیب مشتق شده از ایندول، به عنوان بازدارندههای3-PIM به منظور توسعه مدلهای 3D-QSAR استفاده شده است. ساختارهای سه بعدی ۳۵ ترکیب با استفاده از نرم افزار MOE طراحی و بهینه شدهاند. مرحله تأثیرگذار در اجرای مدل، تراز کردن ترکیبات است. تراز کردن ترکیبات بر اساس بدنه اصلی صورت می گیرد. مقادیر PIC50 از مقادیر تجربی IC50 محاسبه می شود. سپس دادهها به مجموعههای آموزشی و آزمایشی که ویژگیهای ساختاری و فعالیتهای بیولوژیکی را به تصویر میکشند تقسیم می شوند. اعتبار مدلها با استفاده از ²R و ² مجموعهی آزمایشی تأیید می شود. در این کار، از مجموعه ۳۵ ترکیب ۲۹ ترکیب به عنوان مجموعه آموزشی و ۶ ترکیب به عنوان مجموعه آزمایشی انتخاب شدند. کلیه مراحل و محاسبات 3D-QSAR شامل تراز کردن ترکیبات با استفاده از بدنه اصلی (شکل ۱)، تبدیل مقادیر IC50 به PIC50، انتخاب مجموعههای آموزشی و آزمایشی، ایجاد مدلهای CoMFA و CoMSIA، بررسی نقشههای کانتوری برای شناسایی استخلافهای کارآمد، تشکیل کتابخانه و بهینهسازی آن و تخمین فعالیت-های مهارکنندگی ترکیبات کتابخانه توسط نرم افزار SYBYL-X 2.1.1 [6] انجام شده است.

دانگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پاران ۱۴۰۳



شکل۱: بدنه اصلی ترکیبات همراه با نمایش جایگذاری استخلافها و معرفی استخلافهای تاثیرگذار

۳- بحث

 $Q^2 > 0,500$ و CoMFA و CoMSIA و CoMSIA و CoMSIA و مراحل اعتبارسنجی و تایید عبور کردند. مقادیر $Q^2 > 0,500 < R^2$ و $Q^2 > 0,500$ و $Q^2 > 0,500$ و introduction on the set of the set o

CoMFA: $Q^2 = 0.501$, $R^2 = 0.714$, R^2 (pred) = 0.683 CoMSIA: $Q^2 = 0.631$, $R^2 = 0.950$, R^2 (pred) = 0.655

با تایید مدل و نمایش نقشههای گرافیکی، استخلافهای مؤثر شناسایی و کتابخانهای شامل ۶۵۹۱ ترکیب ایندولی تشکیل و بهینهسازی شد. مقادیر فعالیت مهارکنندگی ترکیبات با استفاده از مدلهای CoMFA و CoMSIA تخمین و فعالترین ترکیبات معرفی شدند. بنابراین ترکیب ایندول با استخلافهای نشان داده شده در شکل ۱ قدرت مهارکنندگی قابل توجهی بر پروتئین PIM-3 دارد و میتواند ساختارهای دارویی با قابلیت بالا به نمایش بگذارد.

۴– نتیجه گیری

از بین ۶۵۹۱ ترکیب طراحی شده، اغلب ترکیباتی که در بین یکصد ترکیب فعال تر قرار می گیرند دارای استخلافهای مشخص شده در شکل ۱ به ترتیب در موقعیتهای R³ ،R¹ و X میباشند. با توجه به اعتبار مدلهای معرفی شده، به نظر میرسد با انتخاب و بررسیهای دقیق تر روی ترکیبات فعال تر، از بین ۶۵۹۱ ترکیب طراحی شده، می توان به یافتن مهارکنندههای جدید و قوی تر برای PIM-3 امیدوار بود.

منابع

[1] Walhekar, V., Bagul, C., Kumar, D., Muthal, A., Achaiah, G., & Kulkarni, R. (2022). Topical advances in PIM kinases and their inhibitors: Medicinal chemistry perspectives. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Reviews on Cancer*, 1877(3), 188725.

[2] Toth, R. K., & Warfel, N. A. (2021). Targeting PIM kinases to overcome therapeutic resistance in cancer. *Molecular Cancer Therapeutics*, 20(1), 3-10.

[3] Rathi, A., Kumar, D., Hasan, G. M., Haque, M. M., & Hassan, M. I. (**2021**). Therapeutic targeting of PIM KINASE signaling in cancer therapy: Structural and clinical prospects. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-General Subjects*, *1865*(11), 129995.

[4] Silakari, O., Chand, S., & Bahia, M. S. (2012). Structural Basis of Amino Pyrimidine Derivatives for Inhibitory Activity of PKC-0: 3D-QSAR and Molecular Docking Studies. Molecular Informatics, 31(9), 659-668.
[5] Tripos International. (2012). Sybyl-X 2.1. St. Louis, MO: Tripos Internat



افزایش پایداری آنزیم لیزوزیم از طریق طراحی محاسباتی: یک رویکرد هم افزایی با ترکیب یادگیری عمیق و ترمودینامیک

حمیدرضا کلهر^{او*}، حسن راد کفترودی^۲

ا * دانشیار، شیمی آلی، دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی شریف (kalhor@sharif.edu) ۲- دانشجو کارشناسی ارشد، شیمی آلی، دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی شریف (hassan.rad.k@gmail.com)

واژگان كليدى: ليزوزيم، پايدارى ترموديناميكى، AlphaFold، ProteinMPNN،

۱–مقدمه

بیشتر آنزیمها از جمله لیزوزیم سفیده تخم مرغ (HEWL)، در محیطهای خارج از محیط بیولوژیکی خود پایداری کمی داشته و غیرفعال میشوند. تقریباً، مقدار ΔG باز شدن برای یک پروتئین معمولی تحت شرایط فیزیولوژیکی (دمای ۳۷ درجه سانتیگراد و 7 PH) می تواند بین ۵ تا ۱۵ کیلو کالری در مول باشد. به دلیل اهمیت آنزیمها در صنایع مختلف، یافتن گونههایی پایدارتر از حالت اصلی آن (WT) مهم است^(۱). یک اصل مهم در تا خوردگی پروتئین (ممتعارف برای یافتن گونههای بایدارتر یک ساختار سه بعدی یک پروتئین صرفاً با توالی اسید آمینه آن تعیین می شود. یک راه متعارف برای یافتن گونههای پایدارتر یک آنزیم، جهش توالی DNA آن است^(۲). بهدلیل حضور احتمالات بسیار بالا برای توالی یک آنزیم و نرخ بسیار کم جهشهایی که رشد است. DNA آن است^(۲). بهدلیل حضور احتمالات بسیار بالا برای توالی یک آنزیم و نرخ بسیار کم جهشهایی که رشد است. AlphaFold (به اختصار AF) یک سیستم هوش مصنوعی است که توسط Inpace برای پیشبینی ساختار سهبعدی پروتئینها از توالی اسیدهای آمینه آنها توسعه یافته است. این سیستم دقت فوقالعادهای در پیشبینی ساختارهای پروتئینی، سودمندی در کشف دارو، تحقیقات بیماریها و سایر کاربردهای بیولوژیکی نشان داده است^(۳). همچنین، پروتئینی، سودمندی در کشف دارو، تحقیقات بیماریها و سایر کاربردهای بیولوژیکی نشان داده است^(۳). همچنین، پروتئینی و آزمایشی نشان داده است^(۴). از طرفی، Fold یک ابزار محاسباتی بر پایه ی دادههای تجربی است که برای طراحی پروتئین و تجزیه و تحلیل تغییرات انرژی پایداری به دلیل جهش ها (ΔΔβ) کاربرد دارد^(۵). قصد ما در این پژوهش به کارگیری این سه ابزار برای یافتن گونههای پایدارتر آنزیم HEWL به عنوان یک مدل می باند.

۲-روش

برای حفظ خصلت کاتالیستی آنزیم، ریشههای اطراف لیگاند (دیواره سلولی باکتری) موجود در جایگاه فعال به فاصلهی ۷ آنگستروم ثابت نگه داشته شدند و در تنظیمات جهش توسط ProteinMPNN لحاظ گردید. تکامل ژن لیزوزیم توسط proteinMPNN صورت گرفت و در مجموع ۸ توالی آمینواسیدی بدست آمد که هر کدام مقدار متفاوتی از پارامترهای pLDDT و و و score داشتند. توالی های متفاوت برحسب مقدار pLDDT از مقدار کم به زیاد مرتب شدند. سپس ساختار سوم تمام توالیها توسط AF پیشبینی شدند. مقدار ΔG ساختارها توسط FOLDX محاسبه شدند و مقدار پایداری حاصل شده از جهش توالی آنزیم (MUT) نسبت به آنزیم بدون جهش توسط معادله ۱ محاسبه شد.

جهارمین کنفرانس سمی فنریک ایران

دانگاه اصفیان ۲۹ و ۳۰ آبان ۲۰۳

 $\Delta \Delta G = \Delta G_{folding}^{MUT} - \Delta G_{folding}^{WT}$

(۱) **۳-یحث**

نتایج ΔΔG محاسبه شده برای تمام توالی ها نسبت به آنزیم بدون جهش محاسبه شد (جدول ۱). تمام توالیهای جهش خورده حاصل از ProteinMPNN پایداری ترمودینامیکی بهتری نسبت به آنزیم بدون جهش دارند. همچنین، پایدارترین توالی (seq6) دارای بیشترین مقدار PLDDT نیز میباشد. این درواقع یک پارامتری است که میزان اطمینان از پیشبینی انجام شده را مشخص می کند. ساختارهای پیشبینی شده توسط ابزار Pymol با ساختار اصلی آنزیم مقایسه شدند (شکل ۱) و مقدار RMSD این تطبیق محاسبه شد (جدول ۱). افزایش ساختار دوم صفحه-بتا را میتوان از مهمترین عامل این پایداری ها دانست.

Seq	pLDDT	Score	RMSD	∆G	ΔΔG
•	•				
native				٩٨,١٦	
Seq2	•,٣٤٦٨	•,7751	•,27•	۸١,٢٦	-17,9
Seq3	•,٣٤٦٦	• , ٧ • ٨ ٥	•,£V٣	۷۹,۰٥	-19,11
Seq7	•,٣01٦	•,٧٤٩٣	•,£99	۷٦,۳۳	-21,72
Seq11	•,٣٦١٣	• ,٧٤٤0	۰,٤٣٦	۷۱,۱٥	-77,•1
Seq8	• ,٣٣٨٢	• ,٧००٣	•,££٣	٦٩,٦ £	-77,07
Seq10	•,٣٦٨٩	• , ٧٢ • ٣	• , 201	٦٢,٧٥	-70,01
Seq12	• , ٣ • • ٦	•, ٧٢١ •	•, 57V	٥٤,٧٨	- 28,84
Seq6	•,017•	• ,٧٣٣٢	•,٣٨٩	20,70	-07,91

جدول ۱: دادههای ProteinMPNN و FOLDX



شکل ۱: تطبیق ساختار سه بعدی آنزیمهای جهش خورده (زرد) روی آنزیم بدون جهش (سبز) در حضور لیگاند (آبی).

۳-نتیجه گیری

با پیشرفت هوش مصنوعی و ظهور ابزارهای کاربردی، تکامل یک آنزیم به طور محاسباتی شدنی تر شده است. در این کار برای افزایش پایداری آنزیم لیزوزیم، با استفاده از دو ابزار هوش مصنوعی (ProteinMPNN و AF) توالیهایی پیش بینی شد و توسط ابزارهایی ترمودینامیکی مثل FOLDX مقدار این پایداریها محاسبه شد. طبق جدول ۱ پایدارترین آنزیم شامل بیشترین مقدار pLDDT نیز میباشد. تمام ساختارهای پایدار شده درصد صفحه-بتای بیشتری در ساختار دوم خود دارند.

منابع

- 1. Nawaz, N., Wen, S., Wang, F., Nawaz, S., Raza, J., Iftikhar, M., & Usman, M. (2022). Lysozyme and its application as antibacterial agent in food industry. Molecules, 27(19), 6305.
- 2. Gambardella, G., Notari, S., Cavaterra, D., Iavarone, F., Castagnola, M., Bocedi, A., & Ricci, G. (2022). The anfinsen dogma: Intriguing details sixty-five years later. *IJMS*, 23(14), 7759.
- 3. Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A., Green, T., Figurnov, M., Ronneberger, O., ... & Hassabis, D. (2021). Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. nature, 596(7873), 583-589.
- 4. Dauparas, J., Anishchenko, I., Bennett, N., Bai, H., Ragotte, R. J., Milles, L. F., ... & Baker, D. (2022). Robust deep learning–based protein sequence design using ProteinMPNN. Science, 378(6615), 49-56.
- 5. Buß, O., Rudat, J., & Ochsenreither, K. (2018). FoldX as protein engineering tool: better than random based approaches?. Computational and structural biotechnology journal, 16, 25-33.

میں وجہار میں کنفران شیمی فنزیک ایران میں وجہار میں کنفران شیمی فنزیک ایران دانتگاہ اصفہان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

مطالعه جذب و احیای گاز CO₂ روی نانوقفس های Al₅CuN₆ و Al₁₁CuN₁₂

رحیم رحمن آبادی (*، محمد حق گو^۲، زهرا رستمی^۳، رضا بهجت منش اردکانی^۴

۱ - دانشجوی دکتری تخصصی، شیمی فیزیک، شیمی، علوم پایه دانشگاه پیام نور r.rahmananbadi1018@gmail.com ۲ - استادیار ، شیمی فیزیک، شیمی، علوم پایه دانشگاه پیام نور Mhaqgu@gmail.com ۳-دانشیار ، شیمی فیزیک، شیمی، علوم پایه دانشگاه پیام نور ۴- استاد ، شیمی فیزیک، شیمی، علوم پایه دانشگاه پیام نور ۴ - استاد ، شیمی فیزیک، شیمی، علوم پایه دانشگاه پیام نور

واژگان كليدى: كربندىاكسيد (CO₂)، نانوكيج، نظريه تابعى چگالى (DFT)، احياء، ترموديناميكى، فوتوكاتاليستى

۱– مقدمه

به دلیل تغییر اقلیم و تغییرات آب و هوایی در نتیجه صنعتیشدن ، انتشار آلایندههای اتمسفر در سالهای اخیر چند برابر شده است و جهان برای حفاظت از اتمسفر با چالشهایی برای کاهش آلایندههای اتمسفر مواجه شده است. همچنین یکی از مسائل مهمی که امروزه در جهان اطراف ما وجود دارد شناسایی و حذف آلایندههای اتمسفر مانند کربندیاکسید (CO2) و به حداقل رساندن آنها میباشند. افزایش CO2 در اتمسفر به علت استفاده وسیع از سوختهای فسیلی مشکلات زیست محیطی زیادی را بوجود آورده است که به نظر میرسد دلیل اصلی گرمایش سطح زمین در بیشتر از یک قرن اخیر بوده است[۱]. در نتیجه احیای CO2 به سوختهایی مانند کربن مونواکسید (CO) و متانول (CH₃OH) یک گزینه مناسب برای ذخیره انرژی های تجدیدپذیر و متعادل کردن گرمایش جهانی میباشد[۲۰۳]. نانوقفس های AIN نوار گپ بالایی دارند که منجر به هدایت دمایی و پایداری و سختی بالایی می شود. این ویژگیهای نانوقفسهای AIN آنها را مناسب برای استفاده در شرایط مختلف میسازد. بر همین اساس نانوساختارهای مبتنی بر AIN همانند نانولولهها و نانوصفحهها و نانوقفسها نیز به طور وسیع برای

۲-روش

همه محاسبات با روش نظریه تابعی چگالی (DFT) در سطح B3LYP/6-31G(d) انجام شده است. همچنین توابع تصحیحی-تبدیلی (Perdew-Burke-Ernzerhof) (PBE) برای توصیف تبدیلات و تصحیح انرژی در ساختارهای بهینه شده و محاسبات انرژی کل بررسی شد. محاسبات مکانیک کوانتومی با استفاده از نرمافزار گوسین ۰۹ انجام گرفت. برای رسم نمودارهای DOS از نرمافزار Gauss sum استفاده شده است. در قسمت بعد مکانیسم احیای فوتوکاتالیستی CO2 (E-CO₂R) و واکنشهای تکاملی هیدروژن برای دو نانوکیج Al₁₁CuN₁₂ و اکنشهای تکاملی هروژی برای دو نانوکیج Al₁₁CuN₁₂ و واکنشهای تکاملی هیدروژن برای دو نانوکیج Al₂cuN



۲- بحث و نتیجه گیری

(1)

مقادیر انرژی جذب مربوط به برهم کنش CO2 با نانوقفسهای Al₅CuN₆ و Al₁CuN₁₂ در جدول (۱) گزارش شده است. همان طور که در جدول (۱) نشان داده شده است، انرژی جذب CO2 توسط نانوقفسهای Al₁CuN₁₂ و Al₅CuN₆ به ترتیب برابر ۱۰٬۷۶۵ و ۱۰/۷۶۱ – الکترون ولت است که میتوان نتیجه گرفت نانوقفس Al₁CuN₁₂ جذب شیمیایی قوی تری با CO2 داشته، در حالی که نانوساختار Al₅CuN₆ دارای جذب فیزیکی ضعیف تری نسبت به گاز CO2 است. جذب شیمیایی قوی وCO توسط نانوقفس Al₁CuN₁₂ به دلیل کاهش طول پیوندهای متوسط N-IA است، که منجر به افزایش چگالی بار در پیوندهای Al-N و کاهش انحنای نانوقفس میشود.

نانوقفس	انرژی جذب(الکترون ولت)
Al ₅ CuN ₆	-
CO ₂ @Al ₅ CuN ₆	-1/•• ۵
$Al_{11}CuN_{12}$	-
CO ₂ @Al ₁₁ CuN ₁₂	- \ • /V <i>F</i> \

جدول (۱): مقادیر مربوط به انرژی جذب (Ead) نانوقفسها پس از جذب CO2.

به منظور درک بیشتر مکانیسم احیای فوتوکاتالیستی CO2، محاسبات تئوری ترمودینامیکی روی نانوقفسهای Al₁₁CuN₁₂ و Al₁₁CuN₁₂ ایر محادیات Al₅CuN6 انجام شد و نتایج در شکل (۱) نشان داده شده است. همانگونه که در این شکل مشخص است برای درک بهتر اثر قطر نانوقفس روی گزینش پذیری احیای گاز CO₂ با استفاده از محاسبات تئوری ترمودینامیکی و روش DFT پایداری نانوقفس های تکاملی هیدروژن مورد بررسی قرار گرفت. نانوقفسهای 2001 مالی می است برای درک بهتر اثر یا دان نانوقفس روی گزینش پذیری احیای گاز CO₂ با استفاده از محاسبات تئوری ترمودینامیکی و روش DFT پایداری نانوقفس های 2012 مالی می در این شکل مشخص است برای درک بهتر اثر نانوقفس مالی این روی گزینش پذیری احیای گاز CO₂ با استفاده از محاسبات تئوری ترمودینامیکی و روش DFT پایداری نانوقفسهای 2012 مالی می دروژن مورد بررسی قرار گرفت. بالوقفسهای 2012 مالی می دروژن مورد بررسی قرار گرفت. بر اساس نمودار انرژی آزاد، در شکل زیر انرژی ^{*}اراد نانوقفس Al₁₁CuN₁₂ است و روند انرژی آزاد مشاهده شده رابطه (۱) پیروی این مقدار انرژی بسیار کوچکتر از انرژی آزاد نانوقفس Al₁₅CuN₆ است و روند انرژی آزاد مشاهده شده رابطه (۱) پیروی می درد:

$Al_5CuN_6 < Al_{11}CuN_{12}$

با توجه به رابطه بالا می توان گفت پایداری نانوکیج Al₁₁CuN₁₂ در مقایسه با Al₅CuN₆ افزایش یافته و بهتر حد واسط COOH را جهت احیای گاز CO2 به CO بهتر پایدار می کند. نتایج حاصل اشاره به این دارد که با کاهش انحنای نانوقفس، نانوساختار Al₅CuN₁₂ در مقایسه با کاهش انحنای نانوقفس، نانوساختار Al₁₁CuN₁₂ در مقایسه با کاهش انحنای نانوقفس، نانوساختار Al₁₁CuN₁₂ در مقایسه با کاهش انحنای نانوقفس، نانوساختار Al₁₁CuN₁₂ در مقایسه با کاهش انحنای نانوقفس، نانوساختار



شکل(۱): (A)محاسبات نئوری نرمودینامیکی واکنشهای نکاملی هیدروژن در نانوففسهای AlfCuN6 وAlfiCuN6 (B) محاسبات تئوری ترمودینامیکی مکانیسم احیای فوتوکاتالیستی در نانوقفسهای AlfCuN12 و AlfCuN6

۳–نتیجه گیری

نتایج حاصل از بررسی احیای گاز CO2 توسط نانوقفس های Al₅CuN₆ و Al₁₁CuN₁₂ اشاره به این واقعیت دارد که با کاهش انحنای سطح ساختار، نانوقفس Al₁₁CuN₁₂ برای این منظور مناسب تر است زیرا با بررسی مکانیسم های E-CO₂R و CO₂H مشخص شد که نانوقفس مذکور برای پایدار کردن حد واسط COOH جهت احیای گاز CO₂ از نظر انرژی مطلوب تر است. به طور کلی ایجاد تغییرات در ساختار نانوقفس ها، امکانات نامحدودی را برای طراحی کاتالیزورهای جدید با گزینش پذیری بالا و مؤثر برای احیای گاز CO₂ ایجاد می کند.

منابع

[1]. Service, R. F. The Carbon Conundrum. Science (2004), 305, 962.

[2]. Liu, Y. Wilcox, J. (2013). Molecular simulation studies of CO₂ adsorption by carbon Model compounds for carbon capture and sequestration applications, *Environ. Sci. Technol.* 47, 95–101.

[3]. Liu, Y. Wilcox, J. (2012). Molecular simulation of CO₂ adsorption in micro-and mesoporous carbons with surface heterogeneity, *Int. J. Coal Geol. 104*, 83–95.

[5]. Beheshtian, J., Baei, M.T., Peyghan A.A., & Bagheri, Z. (2013). Nitrous oxide adsorption on pristine and Sidoped A1N nanotubes. *J.Mol. Model.* 19, 943–949.

[6]. Wu, Q., Hu, Z., Wang, X., Chen, Y., & Lu, Y. (2003). Synthesis and Optical Characterization of Aluminum Nitride Nanobelts. *J. Phys. Chem. B.* 107, 9726–9729.

[7]. Beheshtian, J., Ahmadi Peyghan, A., & Bagheri, Z. (2012). A first-principles study of H2S adsorption and dissociation on the AlN nanotube. *Phys-ica E.* 44, 1963–1968.

[8]. Peyghan, A. A., Baei, M. T., Hashemian, S., & Torabi, P. (2013). Adsorption of CO molecule on AlN nanotubes by parallel electric field. *J.Mol. Model.* 19, 859–870.

[9]. Kakanakova-Georgieva, A., Gueorguiev, G. K., Yaki-mova, R., & Janzén, E. (2004). Effect of impurity incorporation on crystallization in AlN sublimation epitaxy. J. Appl. Phys. 96, 5293–5297.

^{[4].} Wu, Q., Hu, Z., Wang, X., Lu, Y., Chen, X., Xu, H., Chen, Y., (2003). Synthesis and characterization of faceted hexagonal aluminum nitride nanotubes. J. Am. Chem. Soc. 125, 10176-10177.



مطالعه DFT خواص جذب تركيبات آلى فرار توسط يك نانو صفحه B2N

رضوان رحیمی^{او*}، محمد سلیمان نژاد^۲

۱ و *- دکتری تخصصی شیمی، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه اراک، r.rahimi1989@gmail.com m-solimannejad@araku.ac.ir - استاد تمام شیمی ، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه اراک، r.rahim

واژگان کلیدی: سطح B₂N، ترکیبات آلی فرار، بازدم انسان، خواص الکترونیکی، خواص انتقالی

۱– مقدمه

امروزه با گسترش صنایع مختلف و آلودگیهای ناشی از آنها، انسان در معرض بیماریهای متعدد ناشی از آلایندهها قرار گرفته است. یکی از موثرترین راهها برای درمان بیماریها، تشخیص زودهنگام است. تجزیه و تحلیل تنفس یکی از روش هایی است که میتواند به عنوان یک روش غربالگری برای تشخیص زودهنگام بیماریها با مزایای خاصی مانند غیرتهاجمی بودن، زمان پاسخ سریع و ارزان بودن مورد استفاده قرار گیرد. هدف این نوع غربالگری اندازه گیری مقدار ترکیبات آلی فرار (VOCs) در بازدم (Sun, 2016) بیمار است. پیشبینی نظری روی نانوصفحات B₃N م₅R₅N م₅R₅N م₈R₀N و M₄ نشان میدهد که M₂R

۲- جزئیات محاسباتی

(٢)

محاسبات تئوری تابعی چگالی (DFT) با مجموعه پایه موج صفحه اجرا شده در اولین اصول کد مکانیک کوانتومی به نام ماژول CASTEP در بسته متریال استدیو (Segall,2002) انجام شد. تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) و تابع PBE همراه با DFT-D2 توسط تصحیح گریم (Grimme, 2006 and Perdew, 1996) استفاده شده است. روش DFT-D2 که توسط گریم ابداع شده است برای توضیح برهمکنشهای دوربرد واندروالس (vdW) در توصیف برهمکنش بین سطح VOC و VOC و VOC های حاوی اکسیژن جذب شده موجود در بازدم، استفاده شد. مقدار بهینهی تعداد نقاط k در منطقه اول بریلوئون ۲×۳×۴ میباشد. انرژی شعاع قطع ۶۰۰ eV با فاصله خلاء ۲۰ Å انتخاب شد. انرژی جذب با استفاده از معادله ۱ بدست آمد. $E_{ads} = E_{complex} - E_{sheet} - E_{VOC}$

E_{sheet} ،E_{complex} و E_{voc} به ترتیب انرژی کمپلکس B₂N/VOC ،سطح B₂N و مولکولهای VOC به طور جداگانه هستند. E_{g1} و E_{g2} مقادیری از انرژی شکاف نواری (E_g) سطح B₂N قبل و بعد از جذب VOC هستند. بنابراین درصد تغییرات در E_g از معادله زیر بدست میآید:

$$\%\Delta E_{g} = \left| \frac{(E_{g2} - E_{g1})}{E_{g1}} \right| \times 100$$



۳- بحث و نتايج

در این کار، ما با عملکرد جذب و سنجش مولکولهای استون، اتانول، متانول، فرمالدئید و H₂O بر روی سطح B₂N با استفاده از تئوری تابعی چگالی دورهای سروکار داریم (شکل ۱، الف). مقادیر E_{ads} برای کمپلکسهای استون/B₂N اتانول/B₂N متانول/B₂N، فرمالدئید/M₂O و B₂N/H₂O و B₂N/H₂O و B₂N ب منتقل متانول/B₂N، فرمالدئید/M₂O و B₂N/H₂O به ترتیب ۵۰.۰۰، ۲۰.۰۰، ۲۰.۰۰ و ۲۰.۰۰ و ۲۰.۰۰ کا است. مقدار بار هیرشفلد منتقل شده از مولکولهای استون، اتانول، متانول و فرمالدئید به سطح به ترتیب ۵۰.۰۰، ۲۰.۰۰ و ۲۰.۰۱ الکترون است. انرژی جذب زمانی که مولکولهای استون، اتانول، متانول و فرمالدئید به سطح به ترتیب ۵۰.۰۰، ۲۰.۰۱، ۲۰.۰۰ و ۲۰.۰۱ الکترون است. انرژی جذب زمانی که مولکولهای استون، اتانول، VOC همزمان وجود دارند، نشان میدهد که مولکولهای NOC میتوانند به طور موثر بر روی سطح جذب زمانی که مولکولهای NOC میتوانند به طور موثر بر روی سطح جذب زمانی که مولکولهای آب و NOC همزمان وجود دارند، نشان میدهد که مولکولهای NOC میتوانند به طور موثر بر روی سطح جذب زمانی که مولکولهای آب و NOC همزمان وجود دارند، نشان میدهد که مولکولهای مای بازیابی محاسبه شده در دمای اتاق برای کمپلکسهای مورد نظر بدون تابش از³-۲۰ × ۲۰ تا ۴۴۰ ثانیه متغیر است. مقادیر محود و مقدار شکاف انرژی مستوی با بازیابی محاسبه شده در دمای اتاق متانول، فرمالدئید، استون و اتانول به ترتیب ۵، ۱۹۰ کا و ۵۵ درصد است. نیمه هادی بودن و مقدار شکاف انرژی مستقیم ۲۰۱۰ میانول، فرمالدئید، استون و ایداری دینامیکی، حرارتی از همگرا شدن منحنی دینامیک مولکولی در دمای اتاق در ۲۰۰۰ و ۲۰ بازی کمپلکس فرمالدئید. موالدی دینامیکی، حرارتی از همگرا شدن منحنی دینامیک مولکولی در مای اتاق در ۲۰۰۰ و ۱۶ بازی کمپلکس فرمالدئید.



شکل ۱. (الف) جذب VOC ^{های} حاوی اکسیژن روی سطح B2N ، (ب) نمودار ساختار نواری و (ج) نمودار دینامیک مولکولی در دمای اتاق برای کمپلکس فرمالدئید/B2N به عنوان پایدارترین کمپلکس.

۴– نتیجه گیری

با توجه به انرژی جذب مناسب، زمان بازیابی و تغییرات قابل توجه در ویژگیهای الکترونیکی، حسگری قابل قبولی در تمامی کمپلکسها ایجاد شد. بیشترین انرژی جذب و بیشترین تغییر جریان تحت ولتاژ بایاس در منحنی جریان_ولتاژ مربوط به کمپلکس فرمالدئید/B2N است که پاسخ الکتریکی و زمان بازیابی مناسبی دارد. نتایج بهدستآمده از این مطالعه خواص حسگری مناسب سطح B2N را نسبت به VOC های حاوی اکسیژن موجود در بازدم انسان نشان میدهد. این یافتهها ممکن است از طریق تجزیه و تحلیل تنفس بازدم بیمار، امکان تشخیص زودهنگام بیماریها را فراهم کند.



منابع و مراجع

[1] Sun, X., Shao, K., & Wang, T. (**2016**). Detection of volatile organic compounds (VOCs) from exhaled breath as noninvasive methods for cancer diagnosis. Analytical and bioanalytical chemistry, 408, 2759-2780.

[2] Lin, S., Guo, Y., Xu, M., Zhao, J., Liang, Y., Yuan, X., ... & Li, Y. (**2022**). AB 2 N monolayer: a direct band gap semiconductor with high and highly anisotropic carrier mobility. Nanoscale, 14(3), 930-938.

[3] Segall, M. D., Lindan, P. J., Probert, M. A., Pickard, C. J., Hasnip, P. J., Clark, S. J., & Payne, M. C. (2002). First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code. Journal of physics: condensed matter, 14(11), 2717.

[4] Grimme, S. (2006). Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. Journal of computational chemistry, 27(15), 1787-1799.

[5] Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. Physical review letters, 77(18), 3865.



تاثیر میدان الکتریکی بر رفتار فازی آب بین دو صفحه بور نیترید

حامد رزاقنیا^ر، محمد کمالوند^{۲و*}

۱ - دانشجو کارشناسی ارشد، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد manal.com/4@gmail.com/ ۲ و ۰۰- نویسنده مسئول : دانشیار ، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد kamalvand@yazd.ac.ir

واژگان کلیدی: آب محدود شده، انتقال فاز، شبیه سازی دینامیک مولکولی، صفحه بور نیترید، میدان الکتریکی

۱–مقدمه

نیاز فوری جوامع به مواد با رسانایی گرمایی بسیار بالا برای همگام شدن با توسعه سریع صنعت الکترونیک، منجر به اکتشاف و استفاده از نانوصفحات بور نیترید شش ضلعی (BNNS) به عنوان یک ماده ایده آل برای کاربردهای پخش و انتقال گرمایی شد. BNNS ها دارای هدایت گرمایی، استحکام مکانیکی و مقاومت در برابر اکسیداسیون زیاد و همچنین عایق الکتریسیته بوده و چگالی کمی دارند (An et al., 2023). بور نیترید یک ترکیب شیمیایی با تعداد برابر نیتروژن و بور بوده که در سال ۱۸۴۲ برای اولین بار بور نیترید با استفاده از پتاسیم سیانید و اسید بوریک مذاب سنتز شد (2014, دار و سطح ویژه زیاد، گرافن، بورنیترید شش ضلعی، ژرمانیوم و سیلیسیوم به دلیل ویژگیهای مناسبی مانند مدول یانگ بالا و سطح ویژه زیاد، کاربردهای موثری در زمینههایی مانند کاتالیزور و فوتوالکتریک دارند (Wang et al., 2017). از سوی دیگر، در حال حاضر سیالات محدود شده در فضاهای نانومتری مانند نانولولهها مورد توجه قرار گرفتهاند. درک خواص آب محدود شده برای کاربردهایی مانند تولید ولتاژ، دستگاههای جریان سریع،سنجش جریان و نانوسیالات مهم است. آب محدود شده همچنین نقش مهمی در بسیاری از فرآیندهای بیولوژیکی مانند جریان از طریق کانالهای یونی نیز ایفا می کند (2017). دربردهایی مانند دولید ولتاژ، دستگاههای جریان سریع،سنجش جریان و نانوسیالات مهم است. آب محدود شده همچنین نقش مهمی در بسیاری از فرآیندهای بیولوژیکی مانند جریان از طریق کانالهای یونی نیز ایفا می کند (2017). دو نقار می دود آب محدود شده در فضاهای کوچک ویژگیهای متفاوت و غیر معمولی را از خود نشان دهد (2017). به علاوه، حضور میدان الکتریکی نیز به دلیل تاثیر بر جهتگیری دوقطبی مولکولهای آب میتواند این رفتار غیرمعمول را تشدید کند (2017) & Sung & Su

۲-روش پژوهش

در این پژوهش اثر میدان الکتریکی بر آب محدود شده بین دو صفحه بور نیترید بررسی شده است. صفحات و تعداد مولکولهای آب با نرم افزار MATLAB و VMD ساخته شده و برای شبیه سازی از برنامه LAMMPS استفاده شد. که در این پژوهش دما ۲۹۸ کلوین و فشار ۱ اتمسفر و همچنین ۸۲۶ مولکول آب درون جعبه ای به ابعاد ۳۰×۳۰×۳۰ آنگستروم در نظر گرفته است. یکی از صفحات بور نیترید در فاصله ۶ آنگستروم از جعبه و فاصله صفحه دیگر از ۲ تا ۵ برابر قطر مولکول آب در نظر گرفته شد. با بررسی ساختار سیال محدود شده، انتقال فاز آب قرار در این محدوده مورد بررسی قرار گرفت. سپس در سه راستای x و y و z هرکدام به طور جداگانه میدان از گران ۱ کار ۲۰ اعمال و انتقال فاز آب محدود شده مورد تحده مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت.



۳-بحث و نتیجه گیری

نتایج شبیه سازی نشان می دهد که اعمال میدان الکتریکی در راستای افقی (موازی با صفحات بور نیترید)، تاثیری بر رفتار فازی آب محدود شده ندارد. از سوی دیگر، اعمال میدان در راستای عمود بر صفحات می تواند رفتار فازی آب محدود شده را دستخوش تغییر گرداند. نتایج نشان می دهند که در حفره هایی که فاصله دو صفحه بور نیترید کمتر از ۳ برابر قطر تقریبی مولکول آب باشد، اعمال میدان تاثیری بر ساختار نخواهد داشت. ولی با افزایش فاصله دو دیواره، همانگونه که در شکل ۱ برای فاصله ۲/۵ برابر قطر مولکول آب دیده می شود، پس از اعمال میدان، تعداد لایه های مولکولی موازی با دیواره ها به طور قابل توجهی افزایش می یابد که دلیلی بر تغییر محسوس ساختار سیال است. برای تایید وقوع انتقال فاز، چگالی میانگین آب محدود شده برحسب میدان اعمال شده نیز مورد بررسی قرار گرفت که نتایج نشان می دهند مشتق اول چگالی برحسب میدان یک تغییر شدید در میدان اکمال شده نیز مورد براسی قرار گرفت که نتایج نشان می دهند مشتق اول چگالی برحسب میدان یک تغییر شدید در میدان المان الکتریکی در راستای عمود که تاییدی بر قوع انتقال فاز، در الار کرفت که در راستای عمود بر دیواره هاست.



شکل ۱ : نمودار زرد رنگ آب محدود شده در عدم حضور میدان الکتریکی و نمودار سبز رنگ در حضور میدان ۱/۰ و نمودار آبی رنگ در حضور میدان ۸/۸ ۷/Å

منابع و مراجع

[1] An, L., Yu, Y., Cai, Q., Mateti, S., Li, L. H., & Chen, Y. I. (2023). Hexagonal boron nitride nanosheets: preparation, heat transport property and application as thermally conductive fillers. *Progress in Materials Science*, *138*, 101154.

[2] Chakraborty, S., Kumar, H., Dasgupta, C., & Maiti, P. K. (2017). Confined water: structure, dynamics, and thermodynamics. *Accounts of chemical research*, 50(9), 2139-2146.

[3] Fu, Z., Luo, Y., Ma, J., & Wei, G. (2011). Phase transition of nanotube-confined water driven by electric field. *The Journal of Chemical Physics*, 134(15).

[4] Pakdel, A., Bando, Y., & Golberg, D. (2014). Nano boron nitride flatland. *Chemical Society Reviews*, 43(3), 934-959.

[5] Wang, J., Ma, F., & Sun, M. (2017). Graphene, hexagonal boron nitride, and their heterostructures: properties and applications. *RSC advances*, 7(27), 16801-16822.

[6] Zhang, X., & Su, J. (2021). Effect of nanotube diameter on the transport of water molecules in electric fields. *Journal of Molecular Liquids*, *328*, 115382.



بررسی نقش کاتیون عاملدار شده در برهم کنش کارواکرول با مایعات یونی آمینواسیدی به کمک شبیهسازی دینامیک مولکولی

زهرا رضاپور'، محمدتقى حامدموسويان ^{**}، محمد رزمخواه^٣ ، فاطمه موسوى بايگى[†]

۱ - دانشجوی دکتری، مهندسی شیمی، شیمی، مهندسی و دانشگاه فردوسی مشهد (Zahra.rezapour@mail.um.ac.ir) ۲ و ۱۰- نویسنده مسئول: استاد، مهندسی شیمی، شیمی، مهندسی و دانشگاه فردوسی مشهد (mosavian@um.ac.ir) ۳- استادیار ، مهندسی شیمی، شیمی، مهندسی و دانشگاه فردوسی مشهد (mohammad.razmkhah@mail.um.ac.ir) ۴- دانشیار، شیمی-فیزیک، شیمی، علوم و دانشگاه فردوسی مشهد (moosavibaigi@um.ac.ir)

واژگان کلیدی: مایعات یونی آمینواسیدی، کارواکرول، گروه عاملی، شبیهسازی دینامیک مولکولی.

۱– مقدمه

تقاضای موادغذایی سالم باعث ظهور افزودنیهای گیاهی شدهاست. کارواکرول (CAR) ترکیب زیستی گیاهی با فرمول شیمیایی C₁.H₁¢O و خواص آنتیاکسیدانی، آنتیباکتریایی و ضدسرطانی است و در گیاهانی مانند پونهی کوهی و آویشن یافت می شود ^۲ و در صنایع غذایی، آرایشی و بهداشتی کاربرد دارد ^{۲; ۲}. خواص بینظیر CAR باعث الزام استخراج آن از گیاهان حاوی این ترکیب زیستی شدهاست. استخراج آن از گیاهان حاوی می شود ^۲ و در صنایع غذایی، آرایشی و بهداشتی کاربرد دارد ^{۲; ۲}. خواص بینظیر CAR باعث الزام استخراج آن از گیاهان حاوی این ترکیب زیستی شدهاست. استخراج با حلال روشی مطلوب برای استخراج این ترکیب زیستی که حلال انتخابی بسیار مهم می این ترکیب زیستی شدهاست. استخراج با حلال روشی مطلوب برای استخراج این ترکیبات است که حلال انتخابی بسیار مهم می باشد. به دلیل ارتباط مستقیم CAR با سلامت مردم، استفاده از حلالهای سبز اهمیت می یابند. مایعات یونی آمینواسیدی می باشد. به دلیل ارتباط مستقیم CAR با سلامت و زیست تخریب پذیری بالا، سمیت بسیار پایین و پایداری گرمایی و شیمیایی (AAILs) با ^۲ امروزه به عنوان حلالهای سبز اهمیت می یابند. مایعات یونی آمیدازولیوم (لا^۱ امروزه به عنوان حلالهای سبز مورد توجهاند. در این پژوهش برهم کنش CAR با علیه این و پایداری گرمایی و شیمیایی و آنیون گلایسینات مورد بررسی قرار می گیرد. به حوی که زنجیره ی پروپیل ایمیدازولیوم با سه گروه کربوکسیل (COOH) و هیدرولیوم با سه گروه کربوکسیل (NHC)، و آنیون گلایسینات مورد بررسی قرار می گیرد. به حوی که زنجیره ی پروپیل ایمیدازولیوم با سه گروه کربوکسیل (OOH) و هیدروکسیل (NHC)، و هیدروکسیل (OOH) و هیدروکسیل (OOH) و هیدروکسیل (NHC)، می گیرد.

۲- روشها

ساختار الکترونی گونهها در سطح محاسباتی B3LPY/6-311++(d,p) بهینهسازی و با روش NBO بارهای جزئی اتمی محاسبه شد. با توجه به توده بودن سیستمها شبیهسازی در جعبهی مکعب انجام و ۲۱۶ جفت یون و ۴ مولکول CAR در نرمافزار دی_ال پلی^۵ ۲/۱۸ تکرار شد. از میدان نیروی AMBER استفاده و شبیهسازی در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm انجام شد. شعاع قطع Å ۸۱و گام زمانی ۱ fs بوده و شبیهسازی به مدت ۳۵ ms صورت پذیرفت.



۳- بحث و نتیجهگیری

بررسی نتایج حاصل از تابع توزیع فضایی (SDF) (شکل ۱) نشان میدهد چگالی احتمال حضور آنیون (ابر بنفش) در اطراف (GLY) بیشتر از کاتیون (ابر قرمز) است. این در حالی است که بیشترین چگالی احتمال حضور مربوط به آنیون ⁻[GLY] در CAR محلال [GLY] میباشد. همچنین مسیر حرکت CAR در کل زمان شبیه سازی رصد شد و مطابق با شکل ۲، حلال [GLY] میباشد. همچنین مسیر حرکت CAR در کل زمان شبیه سازی رصد شد و مطابق با شکل ۲، حلال [GLY] میباشد. همچنین مسیر حرکت CAR در کل زمان شبیه سازی رصد شد و مطابق با شکل ۲، حلال [GLY] میباشد و مطابق با شکل ۲، حلال [GLY] میباشد. همچنین مسیر حرکت CAR در کل زمان شبیه سازی رصد شد و مطابق با شکل ۲، CAR در سیستم [GLY] این حلال [GLY] میباشد و مطابق با شکل ۲، مترین جابه جایی را داشته که نشان از در گیری بالای CAR با آنیون ⁻[GLY] این حلال دارد. ترتیب نتیجه SDF و مسیر حرکت CAR یکسان و به صورت زیر در گیری بالای CAR با آنیون ⁻[GLY] این حلال دارد. ترتیب نتیجه SDF و مسیر حرکت CAR یکسان و به صورت زیر است: [PNH₂MIM][GLY] > [POHMIM][GLY] این حلال دارد. ترتیب نتیجه SDF و مسیر حرکت CAR یکسان و به صورت زیر است (GLY]



نتایج تابع توزیع شعاعی (RDF) بیان می کند آنیون نسبت به کاتیون برهم کنش شدیدتری با CAR برقرار می کند. بنابراین، در تأیید نتایج قبل مشخص می شود آنیون نقش تأثیر گذارتری در انحلال CAR دارد. نمودار RDF که در شکل ۳ آمده است مشخص می کند عامل دار کردن کاتیون باعث افزایش شدت برهم کنش آنیون-CAR و کاتیون-CAR می شود. همچنین نتایج نشان می دهد گروه عاملی NH₂ نسبت به دو گروه عاملی دیگر در انحلال CAR موفق تر عمل می کند.



شکل ۳- نمودار RDF آنیون-کارواکرول و کاتیون کارواکرول در حلالهای مورد مطالعه



منابع و مراجع

[1] Ab Rahim, A. H., Yunus, N. M., Jaffar, Z., Allim, M. F., Zailani, N. Z. O., Fariddudin, S. A. M., Abd Ghani, N., & Umar, M. (**2023**). Synthesis and characterization of ammonium-based protic ionic liquids for carbon dioxide absorption. RSC advances, 13(21), 14268-14280.

[2] Hoca, M., Becer, E., & Vatansever, H. S. (2023). Carvacrol is potential molecule for diabetes treatment. Archives of Physiology and Biochemistry, 1-8.

[3] Rathod, N. B., Kulawik, P., Ozogul, F., Regenstein, J. M., & Ozogul, Y. (**2021**). Biological activity of plantbased carvacrol and thymol and their impact on human health and food quality. Trends in Food Science & Technology, 116, 733-748.

[4] Roosta, M., Ghaedi, M., Daneshfar, A., & Sahraei, R. (2015). Ultrasound assisted microextraction-nano material solid phase dispersion for extraction and determination of thymol and carvacrol in pharmaceutical samples: Experimental design methodology. Journal of Chromatography B, 975, 34-39.

[5] Smith, W., & Forester, T. (**1996**). DL_POLY_2. 0: A general-purpose parallel molecular dynamics simulation package. Journal of molecular graphics, 14(3), 136-141.



بررسی نظری ساختار مولکولی آمفتامین و متآمفتامین، و پتانسیل گرافن برای جذب آنها

لادن رضائيان'، عبدالرضا نكوئى الا*

۱-کارشناس ارشد، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز،l.rezaiean@sutech.ac.ir ۲و*-نویسنده مسئول: دانشیار، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز،nekoei@sutech.ac.ir

واژگان کلیدی: فن اتیل آمین، نظریه تابعی دانسیته، برهمکنش پراکندگی، هزینه محاسباتی

۱– مقدمه

آمفتامین و متآمفتامین که به خانوادهای از داروهای محرک اعصاب معروف به فن اتیل آمین تعلق دارند، با مهار کردن ناقلهای مونوآمین پیش سیناپسی و مونوآمین اکسیدازها باعث افزایش مقدار دوپامین، سروتونین، نوراپینفرین و آدرنالین در دستگاه عصبی مرکزی میشوند و اثراتی مانند بیخوابی، افزایش تمرکز، کاهش خستگی و اشتها را ایجاد میکنند. از آمفتامین برای درمان بیماریهایی چون اختلال نقص توجه و بیشفعالی، نارکولپسی و چاقی استفاده میشود. متآمفتامین عملاً هیچ ارزش پزشکی شناخته شدهای ندارد و به واسطه ایجاد حالت سرخوشی، به عنوان یک داروی تفریحی مورد استفاده قرار میگیرد و به شدت اعتیاد آور است. از عوارض جانبی مصرف آن میتوان به تهوع، استفراغ، گرفتگی عضلات شکمی، کاهش وزن، افزایش فشار خون و ضربان قلب و تشدید تیکهای حرکتی اشاره کرد. مصرف این مواد میتواند در مقادیر زیاد باعث ایجاد آسیب مغزی، کما و مرگ شود (2013).



شكل ۱ : ساختار شيميايي آ) آمفتامين و ب) مت آمفتامين

گرافن یک ساختار دو بعدی متشکل از اتمهای کربن است که به صورت شبکههای لانه زنبوری در کنار یکدیگر قرار گرفتهاند. این ماده با ساختار منحصر به فرد خود دارای ویژگیهای شگفت انگیز متعددی از جمله مساحت سطح ویژه بالا، استحکام و انعطاف پذیری بالا، رسانایی الکتریکی و حرارتی قوی، شفافیت نوری و نفوذناپذیری می باشد. گرافن در صنایع مختلفی همچون الکترونیک، فوتوالکتریک، هوافضا، و در صنعت پزشکی به عنوان حامل دارو کاربرد دارد. همچنین در ساخت سلولهای خورشیدی، نمایشگرها، ابرخازنها، سنسورها و فیلترها مورد استفاده قرار می گیرد (2018).

۲- روش

در این مطالعه، ساختار کانفورمرهای متعدد ممکن برای آمفتامین، متآمفتامین، و همچنین ساختار کمپلکسهای حاصل از جذب آنها بر روی گرافن، با استفاده از نظریه تابعی دانسیته (DFT) از روشهای مکانیک کوانتومی مورد بررسی قرار گرفته است. پایدارترین کمپلکسهای آمفتامین-گرافن، با استفاده از روشهای DFT شامل برهمکنشهای پراکندگی لاندن از جمله B97D ،M062X-D3 ،B3LYP-D3(BJ ،B3LYP-D3 و B97X و مجموعه پایهای (d,p)++18-6 بررسی و پارامترهای مختلف مرتبط با جذب، همچنین سرعت انجام محاسبات، مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. سپس، با انجام محاسبات تک نقطه انرژی در همه روشها، بر روی ساختارهای بهینه شده در هر روش، انرژیهای جذب بدست آمده مورد بررسی قرار گرفته و روشی کارآمد از نظر هزینه محاسباتی و دقت محاسبات پیشنهاد شده است. نهایتاً، پایدارترین کمپلکسهای متآمفتامین-گرافن توسط روش پیشنهادی مورد بررسی قرار گرفته و نتایج انرژی جذب حاصل از آن با نتایج دقیقترین روش محاسباتی ذکر شده، مقایسه و اعتبارسنجی شده است. تمامی محاسبات مکانیک کوانتومی در این مطالعه با استفاده از نرمافزار

داسکاه اصفیان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

۳- بحث و نتايج

مقایسه انرژیهای بهینه شده کامل هر روش با انرژیهای تک نقطه آن روش بر روی ساختارهای بهینه شده توسط سایر روشها نشان داد که میتوان با استفاده از محاسبات تک نقطه توسط یک روش دقیقتر بر روی ساختاری که با یک روش سریعتر بهینه شده، انرژیای نزدیک به انرژی بهینه سازی کامل در روش دقیقتر به دست آورد. با تجزیه و تحلیل کامل این مقایسات، روش **G++113-6/(B3LYP-D3(BJ/*+3++113-6/B97D به عنوان کارآمدترین روش از نظر هزینه محاسباتی و دقت محاسبات پیشنهاد شد. نتایج نشان میدهند که میزان خطای حاصل از این روش نسبت به نتایج حاصل از بهینه سازی کامل در دقیقترین روش، کمتر از حدود ۳ و ۶ درصد، به ترتیب برای جذب آمفتامین و متآمفتامین بر روی گرافن، است.

۴- نتیجهگیری

مقایسهی نتایج انرژیهای جذبی به دست آمده در این تحقیق با نتایج بعضی مطالعات پیشین نشان میدهد که جذب آمفتامین بر روی گرافن از جذب آن بر روی کربونانوتیوپها، B₁₂N₁₁P و ورق کاربید بور قویتر است. همچنین، با توجه به مقایسات، گرافن جاذب بهتری برای آمفتامین و متآمفتامین، نسبت به آمپیرا، گلایسین، استون و افدرین است.

14.5.1115.979,.11

منابع و مراجع

[1] Heal, D. J., Smith, S. L., Gosden, J., & Nutt, D. J. (2013). Amphetamine, past and present–a pharmacological and clinical perspective. *Journal of psychopharmacology*, 27(6), 479-496.

[2] Ren, S., Rong, P., & Yu, Q. (2018). Preparations, properties and applications of graphene in functional devices: A concise review. *Ceramics International*, 44(11), 11940-11955.

[3] Sedlak, R., Janowski, T., Pitonak, M., Rezac, J., Pulay, P., & Hobza, P. (2013). Accuracy of quantum chemical methods for large noncovalent complexes *Journal of Chemical Theory and Computation*, 9(8), 3364-3374.


تهیه حلال اتکتیک عمیق جدید مبتنی بر تیمول و بررسی خواص فیزیکوشیمیایی آن

سولماز رفعتی'، نوسیبه ابراهیمی^{۲و*}، رحمت صادقی^{۳و*}.

rafatisollmaz@gmail.com اول: دانشجوی دکتری شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، n.ebrhimi@uok.ac.ir ۲- نویسنده مسئول: استادیار شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، rsadeghi@uok.ac.ir ۳- نویسنده مسئول: استاد شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، rsadeghi@uok.ac.ir

واژگان کلیدی: حلال اتکتیک عمیق، دهنده پیوند هیدروژنی، گیرنده پیوند هیدروژنی، تیمول

۱– مقدمه

حلالها در تسهیل فرآیندهای شیمیایی در صنایع مختلف نقش اساسی دارند. در سال ۲۰۲۰، بازار جهانی حلالهای آلی معمولی ۴۳۸۴۵/۸میلیون دلار بود که پیش.بینیها حاکی از آن است که تا سال ۲۰۲۸ به ۶۷۸۳۷.۸ میلیون دلار خواهد رسید [۱]. توسعه فناوریهای جدیدی که میتوانند اثرات زیستمحیطی فرآیندهای شیمیایی مختلف را کاهش دهند، برای روپارویی مناسب با مشکلات آلودگی کرهی زمین الزامی است. از این منظر، استفاده از حلالهایی که از اصول شیمی سبز پیروی میکنند می تواند حائز اهمیت باشد، چرا که حلال در اغلب کاربردهای شیمیایی، از فرآیندهای سنتز تا استخراج و پیش تغلیظ نقش اساسم، دارد [۲]. اخیراً حلالهای اتکتیک عمیق (DESs) موضوع مورد توجه پژوهشگران در توسعهی حلالهای سبز با قابلیت جایگزینی حلالهای آلی فرار، مضر و سمی بوده است [۳]. DESها از دو یا چند جزء تشکیل شدهاند که در اثر اختلاط محض و بدون انجام واکنش شیمیایی مایع می شوند. تشکیل DES به برهم کنش های واندروالسی مطلوب و به ویژه پیوند هیدروژنی بین اجزای مخلوط نسبت داده می شود. این برهم کنش های فیزیکی قوی با پایدار کردن پیکربندی مایع، موجب تشکیل فاز مایع در دمای اتاق می شوند؛ به طوریکه دمای ذوب مخلوط در مقایسه با دمای ذوب اجزای خالص به طور چشم گیری کاهش می یابد. غیرفرار بودن، تهیه آسان و بدون استفاده از حلال و واکنش شیمیایی، ارزان بودن و تنظیم پذیری خواص فیزیکی و شیمیایی آنها از طريق انتخاب نوع و نسبت اجزاي سازنده از جمله مزاياي اين حلالهاي نوظهور نسبت به حلالهاي آلي و مايعات يوني است. DES ها با توجه به اجزای سازندهشان به دستههای مختلف تقسیمبندی میشوند، اجزای سازندهی DESهای دسته اول تا چهارم به دلیل الزام وجود یک ترکیب یونی دامنهی کاربرد آنها را محدود میکند. اخیراً دسته جدیدی از DESها بر اساس ترکیبات غیریونی پیشنهاد شده است (دسته پنجم DESها). با توجه به اینکه هر دو گونهی تشکیل دهندهی DESهای دستهی پنجم ساختار مولکولی دارند، نسبت به چهار دسته اول دارای مزایای متعددی هستند و برای اهداف مختلف، بهتر از سایر DESها و حلالهاي آلي رايج عمل مي كنند [۴].



۲- مواد و روش کار

۲-۱- مواد مورد استفاده

تیمول (خریداری شده از مرک) در ترکیب با استامید (خریداری شده از مرک) برای تولید حلال اتکتیک عمیق جدید به کار رفت.

T- T- روش تهیه مخلوطهای DES

نسبتهای مولی مختلف از تیمول و استامید با استفاده از ترازوی دیجیتال مدل CP24S ساخت شرکت Satorius آلمان تهیه و در ویالهای شیشهای ریخته شد. با همزدن مداوم و حرارت ملایم، پس از ۳۰ دقیقه، مایع شفاف و همگن بهدست آمد.

DSC روش انجام

۱۰ الی۳۰ میلیگرم از هر نمونه در بوتههای آلومینیومی مخصوص دستگاه DSC 204 F1 ریخته شد و با دادن برنامه دمایی مشخص آنالیز هر نمونه انجام شد.

۲-۴- اندازه گیری خواص فیزیکوشیمیایی

دانسیتومتر مدل ۵۰۰۰DSA ساخت شرکت Anton Paar برای اندازه گیری چگالی و سرعت صوت، ویسکومتر استوالد برای اندازه گیری گرانروی و رفرکتومتر آزمایشگاهی Abbemat Anton Paar برای تعیین ضریب شکست در گسترهی دمایی ۲۵ تا ۴۵ درجه سلسیوس، برای نسبت مولی ۱:۲ از مخلوط تیمول: استامید، اندازه گیری شد.

۳- نتایج و بحث

تیمول در ترکیب با استامید در نسبتهای مولی مختلف مخلوط پایداری را تشکیل داد که در دمای اتاق مایع بود. تشکیل پیوند هیدروژنی قوی بین دوگونه (تیمول و استامید) موجب کاهش شدید دمای ذوب مخلوط نسبت به اجزای سازنده شد. درشکل ۱ نمودار فاز جامد-مایع بهدست آمده با استفاده از DSC و انحراف منفی رفتار تعادل فاز جامد-مایع مخلوط تیمول : استامید از حالت ایدهال نشان داده شده است.



شكل ۱: نمودار فاز جامد-مايع تيمول: استاميد

۴- نتیجهگیری

مخلوط تیمول : استامید کاهش دمای ذوب شدیدی را نسبت به اجزای خالص نشان داد که گویای برهمکنش مطلوب بین تیمول و استامید است. بررسیها نشان داد که تیمول نقش دهنده و استامید نقش پذیرندهی پیوند هیدروژنی را دارد. چگالی، سرعت صوت، ویسکوزیته و ضریب شکست DES تهیه شده با افزایش دما کاهش مییابد. DES تهیه شده نسبت به آب چگالی کمتر ولی گرانروی بیشتری دارد.

منابع و مراجع

- [1] A.T.N. Fajar, T. Hanada, A.D. Hartono, M. Goto, Estimating the phase diagrams of deep eutectic solvents within an extensive chemical space, Commun. Chem. 7 (2024) 27.
- [2] E. Picciolini, G. Pastore, T. Del Giacco, G. Ciancaleoni, M. Tiecco, R. Germani, aquo-DESs: Water-based binary natural deep eutectic solvents, J. Mol. Liq. 383 (2023) 122057.
- [3] K.A. Omar, R. Sadeghi, Database of Deep Eutectic Solvents and their Physical Properties: A Review, J. Mol. Liq. (2023) 121899.
- [4] W. Zaidi, A. Boisset, J. Jacquemin, L. Timperman, M. Anouti, Deep eutectic solvents based on Nmethylacetamide and a lithium salt as electrolytes at elevated temperature for activated carbon-based supercapacitors, J. Phys. Chem. C 118 (2014) 4033–4042.



بررسی کاربرد حلال اتکتیک جدید مبتنی بر تیمول در استخراج متیلن بلو از محلول آبی

سولماز رفعتی'، نوسیبه ابراهیمی^{۲و*}، رحمت صادقی^{۳و*}.

rafatisollmaz@gmail.com اول: دانشجوی دکتری شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، n.ebrhimi@uok.ac.ir ۲- نویسنده مسئول: استادیار شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، rsadeghi@uok.ac.ir ۳- نویسنده مسئول: استاد شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، rsadeghi@uok.ac.ir

واژگان کلیدی: حلال اتکتیک عمیق، تیمول، متیلن بلو، استخراج مایع-مایع

۱– مقدمه

فرآیند جداسازی اجزای یک جریان مایع از طریق تماس آن جریان با جریان مایع دیگری که ممکن است در آن نامحلول یا فقط تا حدى محلول باشد، استخراج مايع-مايع ناميده مي شود. در اين روش امكان جداسازي اجزاء وجود دارد زيرا برخي از اجزا ترجيح ميدهند در يکي از جريانهاي مايع بيشتر حل شوند. يک مرحله حياتي در فرآيند استخراج مايع-مايم، يافتن يک حلال کارآمد و مقرونبهصرفه است. یک حلال ایدهآل باید عملکرد استخراج بالایی داشته باشد که با انتخاب پذیری بالا، ضریب توزیع بالا، سهولت بازیابی و حداقل نسبت مواد اولیه به حلال مشخص می شود. از منظر زیست محیطی، حلال باید ساز گار با محیطزیست و غیرسمی باشد. از نقطهنظر اقتصادی، حلال باید کمهزینه و در دسترس باشد یا باید بتواند با یک فرآیند سنتز ساده و ارزان تولید شود. علاوه بر این، خواص فیزیکی و ترمودینامیکی حلال، مانند ویسکوزیته، پایداری حرارتی، چگالی و کشش سطحی، از جمله اطلاعات مورد نیاز برای کاربرد در مقیاس صنعتی است. فرآیندهای صنعتی در مقیاس بزرگ معمولاً از حلالهای آلی مانند سولفولان (SUL)، فورفوریل الکل، اتیلن گلیکول، N-متیل پیرولیدون و N-formylmorpholine استفاده می کنند. با اين حال، حلالهاي آلي داراي خواص نامطلوب مانند سميت بالا، اشتعال يذيري، فراريت و هزينه بالاي بازيابي هستند. بعدها، مایع یونی (IL) بهعنوان یک حلال برتر معرفی شد و به دلیل مزایای با ارزشی چون فشار بخار ناچیز و پایداری حرارتی بهطور گسترده توسط محققان مورد مطالعه قرار گرفت. با این حال، علیرغم مزایای آشکار ILها، اکثر آنها برای استفاده در مقیاس صنعتی بسیار گران هستند. همچنین سنتز آنها مستلزم استفاده از حلالهای آلی و مراحل خالصسازی است. برای غلبه بر محدودیتهای ILها، حلالهای اتکتیک عمیق (DESs) بهعنوان جایگزین مناسبی برای ILها و حلالهای آلی مورد بررسی قرار گرفتهاند. اکثر DESها غیرفرار، زیست تخریب پذیر، زیست سازگار، غیر قابل اشتعال و غیر سمی هستند یا سمیت کمی دارند [1].



۲- مواد و روش کار

۲-۱- مواد مورد استفاده

تیمول (خریداری شده از مرک) در ترکیب با استامید (خریداری شده از مرک) برای تولید حلال اتکتیک عمیق جدید بهکار رفت. ازمتیلن بلو (خریداری شده از مرک) و آب دو بار تقطیر برای تهیه محلول آبی جهت استخراج استفاده شد.

T – T – روش تهیه DES

نسبت مولی ۱:۲ از DES تیمول : استامید با توزین مقدار دقیقی از تیمول و استامید (با استفاده از ترازوی Satorius) و سپس همزدن مداوم مخلوط و حرارت ملایم تهیه شد. پس از ۳۰ دقیقه مایعی کاملا شفاف و همگن بهدست آمد.

۲-۳- روش انجام استخراج مایع-مایع

جهت تهیه نسبتهای وزنی مختلف از DES و محلول آبی متیلن بلو، مقادیر خاصی از محلول رنگی و DES با ترازوی دیجیتالی Satorius توزین شد. پس از ۱۰ دقیقه اختلاط به وسیله یمکنت و استایر (با دور ۴۵۰۳pm) و ۱۰ دقیقه سانتریفیوژ (با سرعت ۳۰۰۰۳pm)، به مدت ۳۰ دقیقه در آکواریومی که در دمای C° ۲۵ تنظیم شده بود برای رسیدن به تعادل قرار گرفت. سپس از فاز باقیمانده ی پایین (فاز بالا غنی از DES و رنگ) به وسیله سرنگ و آنژیوکت مقدار سه میلی گرم برداشته و به سل دستگاه اسپکتروفوتومتر انتقال داده شد.

۳- نتايج و بحث

DES جدید تولید شدهی مورد استفاده در این پژوهش، با توجه به گرانروی پایین و گسترهی وسیع مایع بودن این حلال نسبت به سایر DESها، جهت استفاده در فرآیندهای استخراج از محلولهای آبی گزینهی مناسبی میباشد. برای محاسبهی بازدهی استخراج (Ex) از فرمول زیر استفاده شد.

$$Ex\% = \frac{C_i - C_f}{C_i} \times 100$$

که در آن C_i غلظت اولیه محلول رنگی و C_f غلظت نهایی محلول پس از استخراج است. C_f با استفاده از نمودار کالیبراسیون UV-Vis بهدست آمده برای محلولهای آبی استاندارد متیلن بلو محاسبه شد. شکل زیر اثر نسبت وزنی DES به محلول رنگی بر بازدهی استخراج متیلن بلو توسط DES تیمول: استامید را نشان میدهد.



W_{ratio}

شکل ۱ : بررسی اثر نسبت وزنی DES به محلول رنگی در بازدهی استخراج متیلن بلو از محلول آبی توسط حلال اتکتیک عمیق (DES) تیمول: استامید



۴-نتیجهگیری

DES تیمول : استامید عملکرد موفقی در استخراج رنگ متیلن بلو از محلول آبی آن در غلظت اولیه و نسبت وزنی مشخص DES به محلول رنگی نشان داد. نتایج نشان داد که هرچه غلظت اولیهی محلول آبی متیلنبلو بیشتر باشد و همچنین هرچه نسبت وزنی DES به محلول آبی متیلنبلو بیشتر بود، بازدهی استخراج بیشتر است.

منابع و مراجع

[1] M.K. Hadj-Kali, L. El Blidi, S. Mulyono, I. Wazeer, E. Ali, J. Rallapalli, Deep Eutectic Solvents for the Separation of Toluene/1-Hexene via Liquid–Liquid Extraction, Separations 9 (2022) 369.



شبيهسازي ديناميك مولكولي حلال اتكتيك عميق غير يونى مبتنى بر تيمول

سولماز رفعتی'، نوسیبه ابراهیمی^{۲و*}، رحمت صادقی^۳

rafatisollmaz@gmail.com اول: دانشجوی دکتری شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، n.ebrhimi@uok.ac.ir ۲- نویسنده مسئول: استادیار شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، rsadeghi@uok.ac.ir ۳- نویسنده سوم: استاد شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، rsadeghi@uok.ac.ir

واژگان کلیدی: حلال اتکتیک عمیق، تیمول، آمید، شبیهسازی دینامیک مولکولی

۱– مقدمه

حلال یوتکتیک عمیق (DES)، به عنوان یک نوع از حلالهای سبز نوظهور، در دو دهه اخیر توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده و جایگزین مناسبی برای حلالهای آلی مرسوم است که مخاطرات زیستمحیطی زیادی را به همراه دارند. DESها خواص مشترک زیادی با مایعات یونی دارند، از جمله میتوان به دمای ذوب پایین، فراریت ناچیز، تنظیم پذیری خواص و قابليت انحلال بالا اشاره كرد [1,2]. با اين حال، DESها برخي از معايب مايعات يوني، همچون هزينهي زياد و مراحل طولاني سنتز و خالصسازی را ندارند؛ چراکه در تهیهی DESها هیچ نیازی به استفاده از حلال نیست [3]. در واقع،DESها از اختلاط فیزیکی دو گونه که برهمکنش مطلوب دارند ایجاد می شود. اولین DES در سال ۲۰۰۳ توسط ابوت و همکارانش [4] معرفی شد که حین اختلاط اوره و کولین کلرید در نسبت مولی ۱:۲ متوجه یک کاهش دمای ذوب غیرعادی در مقایسه با دمای ذوب اوره خالص ($^{\circ}$ ۱۳۳) و کولین کلرید خالص ($^{\circ}$ ۳۰۲) شدند. آنها دریافتند که دمای ذوب مخلوط نامبرده که رلاین (Reline) نام گرفت، C° ۱۲ است. پس از آن، مطالعات گستردهایی در زمینهی تولید، شناسایی و تعیین خواص فیزیکوشیمیایی DESها توسط پژوهشگران مختلف انجام شده است [5]. در حال حاضر، DESها بر اساس اجزای تشکیل دهندهشان در ۵ نوع طبقهبندی می شوند: نوع ۱) مخلوطی از یک نمک چهارتایی آمونیوم و یک کلرید فلزی، نوع ۲) مخلوطی از یک نمک چهارتایی آمونیوم و یک هیدارت کلرید فلزی، نوع ۳) مخلوطی از یک نمک چهارتایی آمونیوم و یک دهنده پیوند هیدروژنی (HBD) غیریونی (مثل اسيدهاي كربوكسيليك، آميدها و الكلها)، نوع ۴) مخلوطي از يک هيدارت كلريد فلزي و يک HBD غيريوني و نوع ۵) مخلوطي از یک HBD غیریونی و یک پذیرندهی پیوند هیدروژنی (HBA) غیریونی. در این میان، DESهای نوع پنجم (جدیدترین نوع DESها) که فاقد گونههای یونی هستند، به دلیل خواص و کاربردهای جالب توجه، علاقه گروههای پژوهشی زیادی را به خود جلب کردهاند. در این کار پژوهشی از محاسبات شبیهسازی دینامیک مولکولی (MD) برای مطالعهی برهمکنشهای بینمولکولی که منجر به تولید DESهای نوع پنجم می شود بهره برده شده است.

۲- روش انجام محاسبات

شبیه سازی MD توسط بسته نرمافزاری لمپس (LAMMPS) انجام شد. پارامترهای میدان نیروی OPLS برای توصیف اجزای تشکیل دهنده یDES (تیمول و استامید) به کار برده شد [6]. مخلوط دوتایی تیمول و استامید در نسبت مولی ۱:۲ با قرار دادن ۸۰۰ مولکول تیمول و ۴۰۰ مولکول استامید، با موقعیت های تصادفی، در جعبه ی شبیه سازی با استفاده از نرمافزاری PACKMOL تهیه شد. به منظور به دست آوردن چگالی تعادلی، ابتدا شبیه سازی MD با استفاده از مجموعه ی آماری NPT در دمای ۲۹۸/۱۵ کلوین و فشار ۱ بار به مدت ۷ نانوثانیه جهت به تعادل رسیدن سیستم انجام شد. سپس، شبیه سازی NVT با شروع از خروجی نهایی پیکربندی NPT به مدت ۳۳ نانوثانیه ادامه یافت.

دانگاه اصفیان ۲۹ و ۳۰ آبان ۲۰۳

۳- نتايج و بحث

برای تایید قابل قبول بودن میدان نیروی به کار گرفته شده، چگالی شبیه سازی شده DES با مقدار تجربی مقایسه شد و خطای مطلق کمتر از ۲۰/۰ درصد به دست آمد. بنابراین، می توان ادعا کرد که میدان نیروی استفاده شده توصیف مناسبی از پیکربندی و برهمکنشهای مولکولی سیستم مورد مطالعه ارائه می دهد. شکل ۱-آ تابع توزیع شعاعی (RDF) مربوط به محتمل ترین سایتهای پیوند هیدروژنی در مخلوط ۲:۱ تیمول (THY):استامید (ACM) را نشان می دهد. همان طور که از این شکل قابل مشاهده است، نخستین پیک RDF مربوط به هیدروژن گروه هیدوکسیل THY با اکسیژن ACM، نسبت به دیگر RDFها در فاصلهی کمتر (۱۸۱ pm) و با شدت بیشتری رخ داده است. شکل ۱-ب تابع توزیع ترکیبی شعاعی-زاویه ایی (CDF) مربوط به هیدروژن گروه هیدوکسیل THY با اکسیژن ACM را نشان می دهد که طبق تعریف IUPAC یک پیوند هیدروژنی قوی به حساب می آید.



شکل ۱: (آ) RDF مربوط به محتمل ترین سایتهای تشکیل پیوند هیدروژنی در مخلوط ACM-THY و (ب) CDF مربوط به برهمکنش هیدروژن گروه هیدوکسیل THY با اکسیژن ACM.

۴- نتیجهگیری

نسبت مولی DES ۱:۲ فیریونی (DES نوع پنجم) تیمول (THY): استامید (ACM) به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که برهمکنش ACM-THY مطلوب تر از برهمکنش های THY-THY و ACM ACM است. THY نقش دهنده و ACM نقش پذیرنده ی پیوند هیدروژنی را ایفا می کند.



منابع و مراجع

- B.B. Hansen, S. Spittle, B. Chen, D. Poe, Y. Zhang, J.M. Klein, A. Horton, L. Adhikari, T. Zelovich, B.W. Doherty, Deep eutectic solvents: A review of fundamentals and applications, Chem. Rev. 121 (2020) 1232–1285.
- [2] E.L. Smith, A.P. Abbott, K.S. Ryder, Deep eutectic solvents (DESs) and their applications, Chem. Rev. 114 (2014) 11060–11082.
- B. Tang, K.H. Row, Recent developments in deep eutectic solvents in chemical sciences, Monatshefte Für Chemical Mon. 144 (2013) 1427–1454.
- [4] A.P. Abbott, G. Capper, D.L. Davies, R.K. Rasheed, V. Tambyrajah, Novel solvent properties of choline chloride/urea mixtures, Chem. Commun. (2003) 70–71.
- [5] K.A. Omar, R. Sadeghi, Database of Deep Eutectic Solvents and their Physical Properties: A Review, J. Mol. Liq. (2023) 121899.
- [6] L.S. Dodda, I. Cabeza de Vaca, J. Tirado-Rives, W.L. Jorgensen, LigParGen web server: an automatic OPLS-AA parameter generator for organic ligands, Nucleic Acids Res. 45 (2017) W331–W336.

تزئین بوروفن با اتم اسکاندیوم برای ارتقای ظرفیت جذب هیدروژن در آن

سیما روشن^۱، عادل رئیسی^{۲و*}

s.roshan75@grad.kashanu.ac.ir - دانشگاه کاشان، s.roshan75@grad.kashanu.ac.ir ۲ و *- استاد شیمی، گروه شیمیفیزیک، دانشگاه کاشان، - استاد شیمی، پژوهشگاه علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان areisi@kashanu.ac.ir

واژگان كليدى: بوروفن، جذب سطحى، ذخيرهسازى هيدروژن، نظريه تابعى چگالى

۱– مقدمه

استفاده از هیدروژن به عنوان یک منبع انرژی پاک، تجدیدپذیر و با ظرفیت بالا برای جایگزینی سوختهای فسیلی، نیازمند یافتن یک محیط ذخیرهسازی کارآمد است. به تازگی بوروفن، یک نانوساختار جدید بور به دلیل دارابودن وزن سبک، برای ذخیرهسازی هیدروژن پیشنهاد شده است. دو گروه مانیکس (مانیکس، ۲۰۱۵) و فنگ (فنگ، ۲۰۱۶) رشد ورقههای اتمی بور را روی بستر نقره (۱۱۱) به نام بوروفن گزارش کردند که پایدارترین ساختار در بین صفحات دوبعدی آن، β۱2 میباشد (خو، ۲۰۱۶). در پژوهش حاضر، به منظور درک اساسی از کاربرد ذخیرهسازی و بهبود جذب هیدروژن روی بوروفن، اصلاح ساختار بوروفن ۱۲۵ با اتم اسکاندیوم (Sc) با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی مورد ارزیابی قرار خواهد گرفت. سپس ظرفیت ذخیرهسازی ۲۵ روی ساختار بررسی میشود.

۲- روشهای محاسباتی

در این مطالعه تمامی محاسبات با استفاده از نظریهی تابعی چگالی اصلاحشده از مرتبهی دوم (DFT-D2) به روش گریم و توسط بسته DMol³ موجود در نرم افزار Materials Studio انجام شده است. تقریب شیب عمومی GGA با تابعی تبادلی همبستگی PBE و مجموعه پایهی DNP برای انجام محاسبات استفاده شده است. مش بندی نقاط k در منطقهی اول بریلوئن برابر ۲×۲×۷ در نظر گرفته شد. انرژی جذب (Eads) مولکول H2 بر روی ساختارها توسط معادله زیر محاسبه شده است: (1) که در آن Eads از میلی و مولکول H2 به ترتیب انرژی کمپلکس، بوروفن تزئین شده با اتم SC و مولکول H2 هستند.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- اثر جذب اتمهای فلزی روی بوروفن:

ابتدا به منظور بررسی خواص جذب، یک ابرسلول ۳×۲ از بوروفن β₁₂ بهینهسازی شد. سپس یک اتم Sc در هشت موقعیت مختلف و در فواصل مختلف از بوروفن قرار داده شد و برای هر ساختار پس از بهینهسازی، انرژی جذب Sc روی بستر مطابق معادله ۱ محاسبه شد. بر اساس نتایج، مرکز حلقه ششضلعی بهترین مکان برای تزئین Sc روی بوروفن با بالاترین انرژی جذب برابر ۵/۲۴ الکترونولت میباشد.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

۳-۲-ذخیرهسازی هیدروژن روی بوروفن خالص و تزیینشده:

در ادامه به منظور بررسی جذب H₂ روی ساختارها، یک مولکول H₂ در مکانهای مختلف Sc-β₁₂ و بوروفن خالص از جهتهای افقی و عمودی قرار داده و بهینه سازی انجام شد. سپس افزایش ظرفیت ذخیرهسازی H₂ روی ساختار تزیینشده بررسی شد. نتایج نشان داد که انرژی جذب اولین مولکول H₂ روی نانوصفحات بوروفن β₁₂ خالص و تزیینشده با اتم اسکاندیوم به ترتیب ۱۰/۴۴– و ۱۰/۶۷۳– الکترونولت (حدود ۴/۵ برابر) میباشد. بنابراین، میتوان گفت که قرار دادن Sc روی ساختار بوروفن به طور قابلتوجهی برای بهبود انرژی جذب H₂ موثر بوده است. در ادامه افزایش تدریجی مولکولهای H₂ روی ساختار بوروفن تزیینشده با اسکاندیوم نشان میدهد که این ساختار میتواند تا ۱۸ مولکول H₂ با میانگین انرژی جذب ۲۰۱۲– الکترونولت و ظرفیت ذخیرهسازی ۸/۵۸ درصد وزنی را در خود نگه دارد. شکل ۱ پایدارترین پیکربندی را نشان میدهد.



شکل ۱ : هندسه بهینهشده H2-Sc-β12 از نمای بالا و جانبی (چپ)، نمودار چگالی الکترونی حالتهای H2-β12 (میانی) و H2-Sc-β12 (راست)

نمودارهای چگالی الکترونی حالتها (DOS) برای ساختارهای H₂-β₁₂ (میانی) و H₂-Sc-β₁₂ (راست) در شکل ۱ نشان داده شده است. این نمودارها نشان میدهند که هیچ شکاف نواری در اطراف سطح فرمی وجود ندارد. تصویر آیینهای خطوط α و β بیانگر این است که این ساختارها خاصیت مغناطیسی ندارند. بر این اساس میتوان بیان کرد تزیین اتم اسکاندیوم روی ساختار بوروفن β₁2، مطابق با اهداف DOE است و میتواند در طراحی جاذبهای جدید H₂ مورد استفاده قرار بگیرد.

۴- نتیجهگیری

در این پژوهش خواص الکترونی و ساختاری بوروفن β1 تزئینشده با اتم اسکاندیوم و عملکرد جذب و ذخیرهسازی هیدروژن روی این ترکیبات مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان داد که تزئین اتم اسکاندیوم روی بوروفن میتواند انرژی جذب یک مولکول H2 را نسبت به ساختار خالص حدود ۴/۵ برابر افزایش دهد. همچنین افزایش تدریجی مولکولهای H2 روی بوروفن تزیینشده با اسکاندیوم نشان میدهد که این ساختار میتواند تا ۱۸ مولکول H2 با میانگین انرژی جذب ۲۰۰۰- الکترونولت و ظرفیت ذخیرهسازی A/۵۸ H2 درصد وزنی را در خود نگه دارد. نمودارهای DOS هدایت الکتریکی و غیرمغناطیسی بودن ساختارها را تأیید میکنند. این نتایج نشان میدهد تزئین بوسیله Sc می تواند به طور قابل توجهی انرژی جذب H2 را افزایش دهد و با توجه به معیارهای DOE این ساختار میتواند در طراحی جاذبهای جدید H2 به کار برده شود.



منابع و مراجع

- Mannix, A. J., Zhou, X. F., Kiraly, B., Wood, J. D., Alducin, D., Myers, B. D., ... & Guisinger, N. P. (2015). Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs. Science, 350(6267), 1513-1516.
- [2] Feng, B., Zhang, J., Zhong, Q., Li, W., Li, S., Li, H., ... & Wu, K. (2016). Experimental realization of twodimensional boron sheets. Nature chemistry, 8(6), 563-568.
- [3] Xu, S., Zhao, Y., Liao, J., Yang, X., & Xu, H. (2016). The nucleation and growth of borophene on the
- Ag (111) surface. Nano Research, 9, 2616-2



سازوکار فر آیند آسایش غیر تابشی هسته مایکوسپورینها به عنوان پایه ترکیبات موثر در مواد ضد آفتاب طبیعی

سيمين روشن^۱، رضا اميديان^{۲و*}، مايكل هايمس^۳ ، واسيليوس استاوروس[†]

۱ – دانشجو دکتری تخصصی، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، s.roshan@sci.ui.ac.ir ۲ و « – دانشیار شیمی، شیمی کوانتوم و طیفسنجی، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، * r.omidyan@sci.ui.ac.ir

3,4- Professor, Physical Chemistry, School of Chemistry, University of Birmingham, Edgbaston B15 2TT, United Kingdom, v.stavros@bham.ac.uk

واژگان كليدى: ضدآفتاب، مايكوسپورين، پايدارى نورى، آسايش غيرتابشى، ديناميك آسايش فراسريع

۱– مقدمه

تابش فرابنفش میتواند منجر به اثرات نامطلوب سلامتی مانند آفتاب سوختگی، جهش DNA و سرطان پوست شود. گروهی از جاذب های طبیعی تابش فرابنفش ترکیبات مایکو سپورین و آمینوا سیدهای مایکو سپورین مانند میباشند (سینگ، ۲۰۲۱). ACyO الگوی مرکزی مایکو سپورین ها است که در ناحیه ی فرابنفش B جذب می شود. به تازگی گروه پژوهشی استاد راهنمای این مقاله رفتار فوتوفیزیکی و دینامیک مایکو سپورین -گلایسین خنثی، پروتونه شده و زوج یون را بررسی کرده است (هایمس، ۲۰۲۴ و امیدیان، ۲۰۲۳). بر اساس نتایج، آسایش جمعیت از حالت های الکترونی تحریک شده به حالت پایه در محدوده زمانی فمتوثانیه و بدون تولید هر گونه فوتوایزومر صورت می گیرد. در پژوهش حاضر، به این سوال پاسخ داده خواهد شد: آیا پایداری نوری مایکو سپورین ها از حلقه ی مرکزی ناشی می شود یا از زنجیره های جانبی متصل به حلقه ی مرکزی؟

۲- روشهای محاسباتی

هندسهی بهینه شدهی ACyO در حالت پایه در سطح نظری MP2/cc-pVDZ و ID-DFT/wB97XD محاسبه شد. بهینهسازی هندسی نوسانگر با استفاده از روشهای TD-DFT/wB97XD ،RI-ADC(2) و MS-CASPT2 محاسبه شد. بهینهسازی هندسی نقاط تلاقی مخروطی با استفاده از روش SA-CASSCF انجام شد. سطوح انرژی پتانسیل با استفاده از درونیابی خطی در مختصات داخلی (LIIC) در سطح نظری CASPT2/CASSCF تعیین شد. تمامی محاسبات با استفاده از نرمافزارهای توربومول، گاوسین ۱۶ و پنجره باز مولکس انجام شده است. شبیهسازی دینامیک غیرآدیاباتیک با استفاده از روش پرش از سطوح (TSH) بر اساس مدل (2)AC



۳- نتایج و بحث

۳-۱- هندسه بهینهشده، ساختار الکترونی و انرژیهای تحریک:

هندسهی بهینهشده حالت پایه ACyO در شکل ۱ نشان داده شده است. انرژیهای انتقال عمودی و قدرت نوسانگر تا چهارمین حالت تحریکشده یکتایی در فاز گازی و مدل حلال ناصریح در سطوح مختلف تعیین شده است. با توجه به نتایج، اولین انتقال الکترونی (از HOMO-1 به HOMO) دارای ماهیت *ππ و نیز فاقد جذب است. دومین انتقال الکترونی (از HOMO به LUMO ای دارای ماهیت *ππ است. این انتقال به دلیل قدرت نوسانگر قابل توجه، مسئول جذب تابش فرابنفش میباشد. دو انتقال دیگر دارای قدرت نوسانگر ناچیز و ماهیت *πه میباشند.

۲-۳-رفتار فوتوفیزیکی و سطوح انرژی پتانسیل:

به منظور درک بهتر فرآیند آسایش و بررسی پایداری نوری، محاسبات کمینه تلاقیهای مخروطی و سطوح انرژی پتانسیل انجام گردید. دو مسیر آسایش متفاوت برای ACyO پیشنهاد شد (شکل ۱) که Cl2 و Cl4 آسایش فراسریع به حالت پایه را از طریق تبدیل داخلی کنترل میکنند. تلاقیهای مخروطی S1/S0 به ترتیب ۱/۷۰ و ۲۹۶۰ الکترونولت کمتر از انرژی انتقال عمودی S2 هستند و بنابراین هر دو تلاقی مخروطی برای بسته موج حالت تحریکشده S2 قابل دسترسی خواهند بود.



شکل ۱ : هندسه بهینهشده حالت پایه AcyO (چپ)، منحنی انرژی پتانسیل حالت پایه و حالتهای تحریکشدهی یکتایی در سطح CASPT2/CASSCF در امتداد مختصات LIIC (میانی)، منحنی انرژی پتانسیل مسیر انتخابشده (راست)

۳-۳-شبیهسازی دینامیک غیر آدیاباتیک:

به منظور درک بیشتر از رفتار فوتوفیزیکی، دینامیک آسایش ACyO از حالت S² بررسی شد و حداکثر جذب شبیهسازی شده در ۲۳۳ نانومتر بهدست آمد. بر اساس تجزیه و تحلیل ۱۰۳ مسیر تولیدشده، ۶۱ درصد از آنها با تغییر شکل از طریق Cl2 و ۳۹ درصد از طریق Cl4 به حالت پایه آسایش یافتند (شکل ۱). طول عمر حالتهای تحریکشدهی S² و S¹ به ترتیب برابر ۵۶ و ۲۲۱ فمتوثانیه تعیین شده است. بنابراین ACyO میتواند پس از تحریک نوری به حالت S² در ۲۷۷ فمتوثانیه به حالت پایه آسایش یابد. این طول عمر آسایش بسیار کوتاه، پایداری نوری بالای ACyO را تایید میکند.

۴- نتیجهگیری

در منحنی انرژی پتانسیل بدون سد ACyO توسط دو فرآیند غیرتابشی رقیب، از طریق دسترسی به تلاقی مخروطی S1/S₀ در منحنی انرژی پتانسیل بدون سد آسایش مییابد که این نتایج توسط نتایج حاصل از شبیهسازی دینامیک غیرآدیاباتیک نیز پشتیبانی میشوند. طول عمر حالت



تحریکشده در حدود ۲۸۰ فمتوثانیه حاصل شده است. این نتایج بینش سطح مولکولی قابل توجهی را در مورد ریشههای پایداری نوری سامانههای مبتنی بر مایکوسپورین ارائه میکند و نشان میدهد که سامانههای مشتقشده از ساختار هستهای ACyO توانایی محافظت از نور در برابر اثرات مضر تابش فرابنفش و استفاده در ترکیبات ضدآفتاب را ذاتا به همراه دارند.

منابع و مراجع

[1] Roshan, S., Hymas, M., Stavros, V. G., & Omidyan, R. (2024). New theoretical insights on the nonradiative relaxation mechanism of the core structure of mycosporines: The amino-cyclohexenone central template. The Journal of Chemical Physics, 161(9).

[2] Omidyan, R., Shahrokh, L., Whittock, A. L., & Stavros, V. G. (2023). Theoretical Insights into the Ultrafast Deactivation Mechanism and Photostability of a Natural Sunscreen System: Mycosporine Glycine. The Journal of Physical Chemistry A, 127(22), 4880-4887.

[3] Hymas, M., Wongwas, S., Roshan, S., Whittock, A. L., Corre, C., Omidyan, R., & Stavros, V. G. (2024). A multipronged bioengineering, spectroscopic and theoretical approach in unravelling the excited-state dynamics of the archetype mycosporine amino acid. The Journal of Physical Chemistry Letters, 15(29), 7424-7429.



بررسی نظری خواص فتوفیزیکی و انتقال پروتون در حالت برانگیخته در ۱و۴-دی هیدروکسی آنتراکوئینون

اسماء ریگی^{او*}، علی ابراهیمی^۲، آسیه شهرکی^۳

۱ ۱- دانشجو ، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، رایانامه: rigiasma375@gmail.com ۲- نویسنده مسئول: استاد، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، ebrahimi@chem.usb.ac.ir ۲- دکتری ، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، asiiye.shshraki@gmail.com

واژگان كليدى: انتقال پروتون، حالت برانگيخته، محاسبات DFT وابسته به زمان

۱–مقدمه

انتقال پروتون در حالت برانگیخته (ESIPT) یک فرآیند فتوشیمیایی فوق سریع القا شده توسط پیوند هیدروژنی است که نقش مهمی در فرآیندهای فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی ایفا می کند. فلوروفورهای ESIPT دارای خواص فوتوفیزیکی ویژهای مانند جابجایی استوکس بزرگ و خواص فلورسانس دوگانه هستند که منجر به کاربردهای حیاتی به عنوان LED، سوئیچ های مولکولی و تصویربرداری فلورسانس میشود. آنتراکوئینونها ساختارهای آروماتیک سه حلقهای مشتق شده از دی اکسوآنتراسن مولکولی و تصویربرداری فلورسانس می مند که منجر به کاربردهای حیاتی به عنوان LED، سوئیچ های مولکولی و تصویربرداری فلورسانس میشود. آنتراکوئینونها ساختارهای آروماتیک سه حلقهای مشتق شده از دی اکسوآنتراسن هستند. مشتقات آنتراکوئینون به دلیل داشتن ساختار آروماتیک سه حلقهای، جایگاه ویژه و کاربردهای بیولوژیکی متفاوتی از معماند. مشتقات آنتراکوئینون به دلیل داشتن ساختار آروماتیک سه حلقهای، جایگاه ویژه و کاربردهای بیولوژیکی متفاوتی از معمله موثر بر هستند. مشتقات آنتراکوئینون به دلیل داشتن ساختار آروماتیک سه حلقهای، جایگاه ویژه و کاربردهای بیولوژیکی متفاوتی از می منتود منتقات آنتراکوئینون به دلیل داشتن ساختار آروماتیک سه حلقه ای، جایگاه ویژه و کاربردهای بیولوژیکی متفاوتی از جمله ضدقارچ، ضد قاری می می شود. آنتراکوئینون مان تا ساختار آروماتیک سه حلقه ای، جایگاه ویژه و کاربردهای بیولوژیکی متفاوتی از جمله ضدقارچ، ضد قولیزیکی این ترکیب و عوامل موثر بر آن از طریق فرایند ESIPT مورد بررسی قرار گرفته است.

۲-روشهای محاسباتی

تمامی ساختارها در هر دو حالت پایه (S₀) و اولین حالت برانگیخته یکتایی (S₁) با استفاده از تئوری تابعی چگالی، DFT و تئوری تابعی چگالی وابسته به زمان، TD-DFT، در سطح نظری M06-2X/6-311++G(d,P) با استفاده از بستهی نرمافزاری گاوسی ۱۶ بدون هیچگونه محدودیت ساختاری بهینهسازی شدهاند. انجام محاسبات فرکانس برای تایید ترکیبات به عنوان مینیممهای موضعی و همچنین، به دست آوردن فرکانس شیوههای ارتعاشی در دستور کار قرار گرفته است. منحنی انرژی پتانسیل ترکیبات در حالتهای پایه و برانگیخته با استفاده از محاسبات جاروب آزاد تک بعدی و دو بعدی فاصلههای O-H به دست آمده است. آنالیز مکان شناختی توزیع الکترونها روی توابع موج به دست آمده ساختارهای بهینه شده، با استفاده از نظریه کوانتومی اتمها در مولکولها (QTAIM) و نرمافزار AIMALL انجام شده است.



۳-بحث و بررسی نتایج

ساختار مورد نظر به همراه شماره گذاری آن در شکل ۱ نشان داده شده است. تشکیل پیوند هیدروژنی، عاملی برای انجام فرآیند ESIPT در مولکول است. همانطور که در شکل ۱ مشاهده میشود، دو پیوند هیدروژنی درون مولکولی شامل 'O1...H1 و 'O2...H2 برقرار است. طول پیوندهای هیدروژنی مذکور و مقدار چگالی الکترونی (ρ) هر یک، در حالتهای پایه و برانگیخته در جدول ۱ گزارش شده است. طبق داده های جدول ۱، هر دو پیوند هیدروژنی در حالت برانگیخته نسبت به حالت پایه، دارای مقدار ρ بیشتر و طول کمتر هستند که نشاندهنده ی تقویت پیوند هیدروژنی در اولین حالت برانگیخته یکتایی است. بنابراین انتظار میرود فرایند انتقال پروتون در حالت برانگیخته نسبت به حالت پایه با سهولت بیشتری انجام شود.



شکل ۱. ساختار ۱و۴-دی هیدروکسی آنتراکوئینون به همراه شمارگذاری اتمها.

		• • •
چگالی الکترونی در نقطه بحرانی (φ)	فاصله اتمها (Å)	پيوند هيدروژنی
(•.•٢١*) •.•١٩	(1.00) 1.47	01H1'
(•.•٢١) •.•١٩	(1.00) 1.77	O2H2'

جدول ۱. مقادیر طول پیوندهای هیدروژنی و چگالی الکترونی در نقاط بحرانی

*اعداد داخل پرانتز مربوط به حالت برانگیخته است.

محاسبات جاروب آزاد به دو شیوه انجام شده است. در شیوه اول، ابتدا انتقال پروتون در موقعیت ۱ و سپس در موقعیت ۲ و در شیوه دوم، انتقال پروتون در هر دو موقعیت به طور همزمان انجام شده است. منحنیهای انرژی پتانسیل حاصل از روبش سطح انرژی پتانسیل در سطح نظری (G(d,p)++13-30/20-20 در حالتهای پایه و برانگیخته در شکل ۲ نشان داده شده است. با توجه به نمودارهای به دست آمده، سد انرژی انتقال پروتون در موقعیت ۱، در حالت پایه ۲۰۶۷ کیلوکالری بر مول و در حالت برانگیخته ۲۰۱۷ کیلوکالری بر مول و نشان دهندهی سهولت انتقال پروتون در موقعیت ۲ در حالت بایه ۲۰۱۷ کیلوکالری بر مول و در حالت پروتون در موقعیت ۱، سبب تسهیل فرایند انتقال پروتون در موقعیت ۲ در هر دو حالت بایه ۲۰۱۷ کیلوکالری بر مول و در حالت پروتون در موقعیت ۱، سبب تسهیل فرایند انتقال پروتون در موقعیت ۲ در هر دو حالت بایه و برانگیخته میشود؛ بهطوریکه سد انرژی انتقال به ترتیب در حالتهای پایه و برانگیخته معادل ۲۰۱۶ و ۲۰۱۷ کیلوکالری بر مول است (شکل ۲). شیوه دوم مد انرژی انتقال به ترتیب در حالتهای پایه و برانگیخته معادل ۲۰۱۶ و ۱۰۹



شکل ۲. منحنیهای انرژی پتانسیل حاصل از روبش سطح انرژی پتانسیل در سطح نظری (M06-2X/6-311++G(d,p در حالتهای پایه و برانگیخته

۴-نتیجهگیری

فرآیند انتقال پروتون در حالت برانگیخته (ESIPT) برای ترکیب ۱و۴-دی هیدروکسی آنتراکوئینون به طور نظری بررسی شده است. با توجه به دو پیوند هیدروژنی درون مولکولی در ساختار، نتایج نشان میدهد که انتقال تکی پروتون یکی پس از دیگری، مطلوبترین شیوه برای انجام فرآیند است.

منابع و مراجع

Driscoll, E., Sorenson, S., & Dawlaty, J.M. (2015) Ultrafast intramolecular electron and proton transfer in bis (imino) isoindole derivatives. Journal of Physical Chemistry A, 119(22), 5618-5625, 2015.
 Stricker, L., Fritz, E.C., Peterlechner, M., Doltsinis, N.L., & Ravoo, B.J. (2016) Arylazopyrazoles as light-

responsive molecular switches in cyclodextrin-based supramolecular systems. Journal of the American Chemical Society, 138(13), 4547-4554.



بررسی نظری تمایل اتصال دستهای از ترکیبات طبیعی پلیفنولی به پروتئاز اصلی کروناویروس

صفیه ریگی شایسته^{ار®}، علی ابراهیمی^۲، آسیه شهرکی^۳

۱ ۱- دانشجو ، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، رایانامه: rigishayeste@gmail.com ۲- نویسنده مسئول: استاد، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، رایانامه: ebrahimi@chem.usb.ac.ir ۳- دکتری ، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، asiiye.shshraki@gmail.com

واژگان كليدى: پروتئاز اصلى كروناويروس، داكينگ مولكولى، تركيبات طبيعى

۱–مقدمه

شیمی محاسباتی نقش ارزشمندی در کشف و توسعه داروها دارد. هزینههای هنگفت و زمان بر بودن فرایندهای طراحی دارو از چالشهای اصلی این حوزه به شمار میرود. شیمی محاسباتی با استفاده از ابزارها و تکنیکهای قابل قبول توانسته نقش مهمی در این زمینه ایفا کند که هم در تحقیقات دانشگاهی و هم در شرکتهای بزرگ داروسازی دنیا به طور گسترده مورد استفاده قرار می گیرد. یکی از ابزارهای معمول شیمی محاسباتی در فرآیند طراحی دارو، تکنیک داکینگ مولکولی، روشی برای پیش بینی تمایل اتصال یک مولکول به مولکول دیگر، برای تشکیل یک کمپلکس پایدار است. محاسباتی در فرآیند طراحی دارو، تکنیک داکینگ بیولوژیکی می تواند برای بیش بینی تمایل اتصال یک مولکول به مولکول دیگر، برای تشکیل یک کمپلکس پایدار است. محاسبات داکینگ مولکولی در فرایندهای بیولوژیکی می تواند برای بررسی سه نوع اتصال، پروتئین-پروتئین، DNA-پروتئین، پروتئین-لیگاند، استفاده شود. داکینگ پروتئین-لیگاند بیشترین کاربرد را برای پیش بینی فعالیتهای بیولوژیکی لیگاند و برهمکنش های آن با پروتئین دارد. در این کار، روش های محاسباتی برای مهار پروتئین اصلی کروناویرروس (SARS-CoV-2)، عامل بیماری کووید-۱۹، به کار گرفته شدهاند. بدین منظور، کتابخانهای از ترکیبات طبیعی طراحی شده و فعالیت آنها در مقابل پروتئین هدف مورد بررسی قرار گرفته است. شیمی فرآوردههای طبیعی نه تنها مبنای علمی استفاده

۲-روش های محاسباتی

بهینهسازی لیگاندها، کتابخانهی دوازده عضوی از ترکیبات طبیعی پلی فنولی، با استفاده از بسته نرمافزاری گاوسی ۱۶ به روش نیمه تجربی PM6 انجام شده و برای محاسبات داکینگ مولکولی استفاده شده است. همچنین، پروتئاز اصلی کروناویروس با کد 6W9C از بانک دادههای پروتئین استخراج شد. محاسبات داکینگ مولکولی به وسیلهی دو بستهی نرمافزاری MOE و شرودینگر انجام شد که در حال حاضر از پرکاربردترین نرمافزارها در حوزه طراحی محاسباتی دارو به شمار میروند. در هر یک از نرمافزارها، آمادهسازی پروتئین، تعیین جایگاه فعال و سپس محاسبات داکینگ انجام شد.



شکل ۱. ساختار برخی از لیگاندهای مورد استفاده.

نتایج به دست آمده از محاسبات داکینگ مولکولی در شکل ۳ خلاصه شده است. همانطور که مشاهده میشود، نتایج به دست آمده با استفاده از هر دو نرمافزار روند تقریباً یکسانی دارند. با توجه به شکل ۳، مقادیر انرژی اتصال به دست آمده برای همهی ترکیبات قابل توجه است و اختلاف انرژی اتصال به دست آمده در هر نرمافزار برای ترکیبات مختلف، کمتر از ۱ کیلوکالری بر مول است. بنابراین، میتوان گفت همهی ترکیبات، توانایی اتصال مناسب و مطلوب به جایگاه فعال پروتئاز اصلی ویروس را دارند.



شکل ۳. مقادیر انرژی اتصال به دست آمده از محاسبات داکینگ مولکولی با استفاده از نرمافزار MOE (رنگ آبی) و شرودینگر (رنگ زرد).

در شکل ۴ نحوه جهت گیری ترکیب ۱ در جایگاه فعال پروتئین با داشتن بیشترین انرژی اتصال نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود پیوند هیدروژنی بین ترکیب ۱ و باقی مانده های جایگاه فعال شامل Gln 76، Glu80، Arg 179، Asn 17، As Glu222، Gly135، Asn 111، Thr 286، Ala 267، Trp 220، Ser 287 م Gly 135 م Gly 260.



شکل ۴. نمایش دو بعدی و سه بعدی نحوه جهتگیری ترکیب ۱ در جایگاه فعال پروتئین با کد 6W9C.

۴–نتیجه گیری

فعالیت ضدویروسی دستهای از ترکیبات طبیعی پلیفنولی در مقابل پروتئاز اصلی ویروس SARS-CoV-2 با استفاده از محاسبات داکینگ مولکولی مورد بررسی گرفت. نتایج نشان میدهد که همهی ترکیبات دارای توانایی اتصال مناسب و مطلوب به پروتئین، از طریق تشکیل چندین پیوند هیدروژنی با مهمترین یاقیماندههای جایگاه فعال پروتئین هستند.

منابع و مراجع

[1] Eastman, R. T., Roth, J. S., Brimacombe, K. R., Simeonov A., Shen M., Patnaik S., & Hall, M. D. (2020). Remdesivir: A Review of Its Discovery and Development Leading to Emergency Use Authorization for Treatment of COVID-19. ACS Central Science, (6)5, 672-683.

[2] Hernández-Bolio, G. I., Ruiz-Vargas, J. A., & Peña-Rodríguez, L. M. (2019). Natural Products from the Yucatecan Flora: Structural Diversity and Biological Activity. Journal of natural products, (82)3, 647-656.



شناسایی و حذف گاز NO با استفاده از سطح h-BN آلاییدهشده با گوگرد

محمد رضا زمانی سیفیکار^۱، زهرا توانگر^{۲و*}

zamaniseyfikarl372@gmail.com، دانشگاه کاشان. z.tavangar@kashanu.ac.ir، دانشگاه کاشان.۲

واژگان کلیدی: سطح h-BN آلاییده شده با گوگرد، NO، حسگری، DFT

۱– مقدمه

با توسعه اقتصاد و صنعت، آلایندههای گازی به طور مداوم در جو منتشر می شوند. قرار گرفتن در معرض گازهای سمّی اکسید نیتروژن موجب سوزش چشم یا گلو و کاهش عملکرد ریه می شود (Kampa, 2008). برای غلبه بر محدودیت ناشی از شکاف نواری بالای سطح h-BN، محققان تأثیر جایگزینی اتم های گو گرد را بررسی کردهاند (Zhao, 2019). در این مطالعه، از محاسبات DFT برای بررسی عملکرد نانوصفحات نیترید بور آلاییده شده با گو گرد در جذب، شناسایی و حذف گاز NO استفاده شده است.

۲-جزییات محاسباتی

(1)

تمامی محاسبات براساس نظریه تابعی چگالی (DFT) از طریق نرمافزار DMol³ در بسته متریال استدیو (Delley, 2000) از عریف نرمافزار IPBe) در بسته متریال استدیو (Delley, 2000) انجام شدهاست. تقریب گرادیان تعمیمیافته (GGA) با تابعی پردو-بورک-ارنزرهوف (PBE)- (Perdew, 1992) برای محاسبه انرژی تبادل همبستگی با مجموعه پایه TNP، استفاده شد. روش DFT-D2 گریم برای تصحیح محاسبه برهمکنشهای دوربرد واندروالسی استفاده شد. برای انجام محاسبات از مقدار بهینهشدهٔ ۲۰۵۰ برای نقاط k و فاصله خلاء Å در استفاده شدهاست. انرژی جذب مولکول NO بر روی سطح با کمک معادله زیر محاسبه شدهاست.

 $E_{ads} = E_{NO/Surface} - E_{surface} - E_{NO}$

در این رابطه، ،E_{NO/Surface} انرژی کل سطح بهینهشده همراه با مولکول NO جذبشده را نشان میدهد. E_{surface} و E_{NO} به ترتیب انرژی سطح و یک مولکول NO را نشان میدهند. درصد تغییرات شکاف نواری در اثر فرایند جذب، با رابطه زیر محاسبه شدهاست. در این رابطه، E_{g1} و E_{g2} به ترتیب مقادیر شکاف نواری را، قبل و بعد از جذب نشان میدهند:

$$\%\Delta E_{g} = \left[\frac{E_{g_{2}} - E_{g_{1}}}{E_{g_{1}}}\right] \times 100 \tag{(7)}$$

۳-نتايج و بحث

در این مطالعه، توانایی سطح h-BN بکر و آلاییده مده با گوگرد، به عنوان حسگر یا جاذب مولکول NO، بررسی شده است. آلاییده شدن سطح به سه روش مختلف روی سطح بررسی شد. نامگذاری سطوح حاصل شده، S_B، S_N، و S_B، بر مبنای آن است که اتم گوگرد جایگزین چه اتم یا اتم هایی از سطح شده است. برهمکنش مولکول NO با سطح h-BN بکر با انرژی جذب eV ۲۰/۱۲- و متوسط فاصله برهمکنش Å ۲/۹۳ از سطح، همراه است. در حالیکه جذب مولکول NO روی سطوح S_N، S_B و S_B به ترتیب با انرژی های V-17 م ۲/۵۷- و ۲/۹۳- همراه است. در حالیکه جذب مولکول NO روی سطوح S_N و S_B و S_B به می شود (جدول ۱). بر این اساس می توان سطح MS را یک حسگر با زمان بازیابی مناسب برای گاز NO در نظر گرفت. در حالیکه، سطوح S_B و S_N با انرژی اتصال مناسب، برای حذف این گاز از محیط مناسب تر هستند. مقادیر بار جابه جاشده در حین فرایند جذب، نشان دهنده انتقال بار از سطح به NO می باشد. برای بررسی تاثیر جذب گاز NO بر خواص الکترونی سطح، چگالی دالیکه، سطوح s_N برای سطوح MS استخراج و در شکل ۲ ارائه شده است. جابجایی پیکهای p سطح، به سمت نوار هدایت در نزدیکی سطح فرمی، به خوبی انتقال بار از سطح را تایید می کند. همچنین پهن ترشدن این پیکها و جابجایی آنها به سمت سطح فرمی موید برهمکنش قوی مولکول NO با سطح است. از طرف دیگر پیکهای مربوط به اتم های سطح، هراین در نزدیکی سطح فرمی موید برهمکنش قوی مولکول NO با سطح است. از طرف دیگر پیکهای مربوط به اتم های سطح می فرایند جذب تغییر چندانی نکرده دو نوقط به سمت انرژی های پایین تر جابجا شدند که با برهمکنش ضعیف این مولکول با سطح مطابقت دارد.

دانسکاه اصفیان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳



شکل ۱: ساختارهای بهینه NO/S_N (راست) وNO/S_{BN} (چپ).

جدول ۱: انرژی جذب مولکول NO روی سطوح h-BN بکر و آلاییده شده با گوگرد، درصد تغییرات در انرژی شکاف نواری (ΔEg/٪) و انتقال بار مولیکن بین NO و سطح.

System	Eads (eV)	%ΔEg	Q (e)
NO/h-BN	-•/1۲	٩٢	_•/•۶
NO/S _B	- 1/YA	۱۳۰	-•/Y۵
NO/S_N	-۲/۵۵	1 Y 1	-•/Δ•
NO/S _{BN}	-•/YF	٩۶	-•/•Y



شکل ۲: چگالی حالتهای جزیی مربوط به اتمهای سطح، قبل و بعد از جذب مولکول NO روی سطح S_N و S_B. خطچین مشکی سطح فرمی را نشان میدهد.

۴–نتیجه گیری

h-BN محاسبات DFT، برای بررسی برهمکنش مولکول NO با سطح h-BN بکر و آلاییده شده با گوگرد استفاده شد. سطوح -h BN و SN به ترتیب کمترین و بیشترین انرژی اتصال و تغییر در شکاف انرژی را نشان دادند. این یافته ها نشان میدهد که نانوصفحات h-BN آلاییده شده با گوگرد با توجه به شیوه جایگزینی اتم گوگرد می توانند به عنوان بستری مناسب برای شناسایی یا حذف مولکول NO مورد استفاده قرار گیرند .

منابع و مراجع

[1] Kampa, M., & Castanas, E. (2008). Environmental pollution, 151(2), 362-367.

[2] Zhao, G., Wang, A., He, W., Xing, Y., & Xu, X. (2019). Advanced Materials Interfaces, 6(7), 1900062.

[3] Delley, B. (2000). The Journal of chemical physics, 113(18), 7756-7764.

[4] Perdew, J. P., Chevary, J. A., Vosko, S. H., Jackson, K. A., Pederson, M. R., Singh, D. J., & Fiolhais, C. (1992). Physical review B, 46

مطالعه ترموديناميكي مزوساختار TiO2/SBA-16-NH2 به عنوان سيستم دارورساني

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

فاطمه ساکی^{او»}، محمدحسین فکری^۲، مریم رضویمهر^۳، سمانه سلیمانی[†].

۱ - دانشجوی دکتری، شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت الله بروجردی، رایانامه : sakyfatmh96@gmail.com ۲- دانشیار، شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت الله بروجردی، رایانامه : ۳- استادیار، شیمی معدنی، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت الله بروجردی، رایانامه : ۴- دانشجوی دکتری، شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت الله بروجردی، رایانامه : ۴- دانشجوی دکتری، شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت الله بروجردی، رایانامه :

واژگان کلیدی:TiO2/SBA-16-NH2، کارمابازپین، بارگیری دارو، سیستم دارورسانی، پارامترهای ترمودینامیکی، نانوذرات

۱–مقدمه

پیشگیری و درمان بیماریها توسط مواد زیستی و شیمیایی، دارورسانی نامیده میشود. دارورسانی در کنار سایر روشهای درمان از جمله درمانهای فیزیکی، جراحی، رواندرمانی و استفاده از اشعهها یکی از اصلی ترین و مهمترین روشهای درمان در پزشکی محسوب می گردد که همراه با ارتقای بهداشت، رژیمهای غذایی مناسب و شرایط سالم تر برای زندگی بر سلامت، طول عمر و کیفیت زندگی انسانها موثر است. پیشرفتهای گسترده در علم ژنتیک و بیولوژی مولکولی موجب گشودن دریچهای نو در علم دارورسانی شده است. با کمک روشهای شیمیایی و سنتزی نوین، می توان داروهایی با ساختارهای جدید در مدت زمان کوتاه تر تولید کرد. [۱] سیلیکاهای منظم با مزوپورهای قفس مانند بزرگ در چند سال گذشته توجه زیادی را به خود جلب کردهاند. در میان سیلیکاهای قفس مانند، BBA-16 با تقارن Im3m و ساختار مکعبی با استفاده از کوپلیمر پلورونیک F127 سه بلوکی پلی (اتیلن اکسید) – پلی (پروپیلن اکسید) – پلی (اتیلن اکسید) با قطر منافذ بالای ۵ نانومتر سنتز میشود.

۲-روشها

در این مطالعه نانوکامپوزیت TiO2/SBA-16-NH2 سنتز شد. سپس نانوکامپوزیت با استفاده از تکنیک الگوی پراش اشعه ایکس شناسایی شد. پس از تایید صحت ساختار سنتز شده، ;کارمابازپین بر روی نانوکامپوزیت TiO2/SBA-16-NH2 بارگذاری شد و پارامترهای ترمودینامیکی مورد بررسی قرار گرفت.

۳-نتايج و بحث

شکل ۱ الگوی پراش اشعه ایکس نانوکامپوزیتهای TiO2/SBA-16-NH2 را نشان میدهد. زاویه گسترده نانوکامپوزیت یک پیک پهن در محدوده ۳۰-۲۰ درجه اما با شدت کم مربوط به ساختار مکعبی SBA-16 را نشان میدهد. همچنین، الگوی پراش اشعه ایکس وجود فاز آناتاز TiO2 را در نانوکامپوزیت آماده شده تایید میکند. در الگوهای XRD پیکهای پراش در ۲۵/۳



شکل ۱ : الگوی پراش اشعه ایکس



شکل ۲ : نمودار ترمودینامیک بارگذاری داروی کارمابازپین بر روی نانوحامل2/SBA-16-NH

جدول ۱ : مقادیر پارامترهای ترمودینامیکی بارگذاری دارو

R ²	ΔG° (Kj.mol ⁻¹)	ΔS° (Kj.mol ⁻¹)	ΔH° (Kj.mol ⁻¹)	LnK	دما (كلوين)
	$-\lambda/Y$			37/47	۳۰۳
	$-\lambda/\Upsilon$			۲/۹۵	۳۱۳
٠/٩٩٧۵	− Υ/٩	-•/• ~ Y	-19/9٣	۲/۸۸	۳۲۳
	-V/ <i>۶</i>			۲/۷۰	444
	-Y/Y			۲/۴۶	۳۴۳

۴–نتیجهگیری

این پژوهش برای تعیین پارامترهای ترمودینامیکی نانوکامپوزیت TiO2/SBA-16-NH2 به عنوان سیستم دارورسانی داروی کاربامازپین انجام شد. نانوحامل TiO2/SBA-16-NH2 با موفقیت با استفاده از یک روش تک مرحلهای سنتز شد. مطالعات ترمودینامیکی نشان داد که فرآیند بارگذاری دارو گرمازا و خودبهخودی است.

منابع

[1] Fekri, M. H., Soleymani, S., Razavi Mehr, M., & Saki, F. (2023). Removal of methyl orange dye from aqueous solutions by SBA-16 nano mesopore and optimization of effective parameters using response surface method. *Iranian Journal of Health and Environment*, *16*(2), 339-356.

[2] Fekri, M. H., Soleymani, S., Mehr, M. R., & Akbari-adergani, B. (2022). Synthesis and characterization of mesoporous ZnO/SBA-16 nanocomposite: Its efficiency as drug delivery system. *Journal of Non-Crystalline Solids*, *591*, 121512.

[3] Soleymani, S., Razavi Mehr, M., Fekri, M. H., & Saki, F. (2023). Modification of SBA-16 surface by-NH₂ group and its application as adsorbent. *Chemical Papers*, 77(9), 5129-5141.

[4] Fekri, M. H., Saki, F., Razavi-mehr, M., & Soleymani, S. (2023). Preparation of SBA-16 silicate nanoabsorbent by green method from reed plant stem, using it to remove Phenolphthalein pollutant and investigating effective factors by RSM method. *Applied Chemistry*, *18*(68), 271-288.



اثر تغییر آنیون بر الکترولیت مایع یونی با کاتیون متقارن سولفونیوم در باتریهای لیتیم-یون

مرضیه سبزی سروستانی^۱*، حسین حقانی^۲، محمدمهدی علویانمهر^۳

۱ «- دانشجو ، شیمی فیزیک، علوم پایه، دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی شیراز marziye.sabzi1996@gmail.com ۲-استاد، شیمی فیزیک، علوم پایه، دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی شیراز haghani@sutech.ac.ir ۳- استاد، شیمی فیزیک، علوم پایه، دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی شیراز alavinmehr@sutech.ac.ir

واژگان كليدى: سولفونيوم، مايعات يونى، DFT

۱–مقدمه

باتری وسیلهای الکتروشیمیایی است که توانایی ذخیره کردن الکتریسیته به شکل انرژی شیمیایی و آزاد کردن آن را دارد. باتریها دارای ۴ جز اصلی کاتد، آند، جداکننده و الکترولیت هستند.(بتاچارجی و همکاران،۲۰۱۴) الکترولیت علاوه بر هدایت یون لیتیم میان کاتد و آند، باعث نفوذ آنها به درون مواد فعال و متخلخل کاتدی و آندی می شود.(یوشیو و همکاران،۲۰۱۹) الکترولیتهای آلی چگالی انرژی و توان بالایی دارند؛ اما گزینهی مناسبی برای باتریها نیستند؛ زیرا ظرفیت گرمایی و پایداری حرارتی کمی دارند، فرار و قابل اشتعال بوده و برای ذخیره انرژی در مقیاس بزرگ خطرناک هستند.(مانوهار و همکاران،۲۰۱۸) الکترولیتهای مبتنی بر مایعهای یونی می توانند بسیاری از مشکلات الکترولیتهای آلی را برطرف کنند. پس برای ساخت باتری و اندولیتهای مبتنی بر مایعهای یونی می توانند بسیاری از مشکلات الکترولیتهای آلی را برطرف کنند. پس برای ساخت باتری و نقطه ذوب پایین دارند. (مانادی و همکاران،۲۰۱۹) مایعهای یونی دستهای از نمکها هستند که از کنار هم قرار گرفتن کاتیون و و نقطه ذوب پایین دارند. مایعهای یونی برهمکنشهای ضعیفی میان یونهای خود دارند و می توانند در وسایل مختلف و نقطه ذوب پایین دارند. مایعهای یونی برهمکنشهای ضعیفی میان یونهای خود دارند و می توانند در وسایل مختلف و نقطه ذوب پایین دارند. مایعهای یونی برهمکنشهای ضعیفی میان یونهای خود دارند و می توانند در وسایل مختلف برخوردارند. کاتیونها ساختاری حجیم و آلی و آنیونها ساختاری آلی یا معدنی دارند. هر آنیون و آنیون و آنیون و آنیون ه می تواند در و گیهای میان کاتیون و آنیون و آنیون و آنیون و آنیون و آنیون می می نیزد. در اینون و آنیون قابل تنظیم در خوردارند. کاتیونها ساختاری حجیم و آلی و آنیونها ساختاری آلی یا معدنی دارند. هر آنیون و کاتیون و آنیون قابل تنظیم می تواند ویژگیهای خاصی را به مایع یونی بدهد؛ به عبارت دیگر ویژگیهای مایع یونی با تغییر کاتیون و آنیون قابل تنظیم

نمکهای لیتیم ایمید مانند لیتیم بیس(تری فلوئورومتان سولفونیل) ایمید (LiTFSI) و کاتیون سولفونیوم انتخابی مناسب در باتریهای لیتیم-یون به شمار میآیند. آنیون TFSI میتواند پایداری شیمیایی و حرارتی الکترولیتها را بهبود ببخشد و سبب ایمنی بیشتر شود. سولفونیوم نیز کاتیونی با رسانایی بالا و ویسکوزیته پایین است و با کاهش نقطه ذوب میتواند ویژگی الکترولیتها را بهبود ببخشد. (وانگ و همکاران،۲۰۱۴) این مطالعه قصد دارد ویژگیهای نمک LiTFSI محلول در مایع یونی [SimiTFSI] و [SimiTFSI] را مورد بررسی قرار دهد و سپس با جایگزینی آنیون FSI تغییرات حاصل را ارزیابی کند.





شکل۱: ساختار آنیون سازنده مایعهای یونی. الف) TFSI ب) FSI

۲-روش

شیمی محاسباتی محدودهی وسیعی از روشها و تقریبها را در بر می گیرد و با استفاده از اصول ریاضی به حل مسائل شیمی می پردازد و می توان برای پیشبینی ساختار و خواص مولکولها از آن استفاده نمود. این پژوهش به صورت محاسباتی و با استفاده از نظریهی تابعی چگالی(DFT) انجام شده است. ابتدا مولکولها از آن استفاده نمود. این پژوهش به صورت محاسباتی و با استفاده از نظریهی تابعی چگالی(DFT) انجام شده است. ابتدا مولکولها در سطح B3LYP و مجموعه پایه(d,p)++6-6 بهینه شده و محاسباتی و با ستفاده نمود. این پژوهش به صورت محاسباتی و با استفاده از نظریهی تابعی چگالی(DFT) انجام شده است. ابتدا مولکولها در سطح B3LYP و مجموعه پایه(d,p) انجام شده است. ابتدا مولکولها در سطح ude مشد. محاسبه برهمکنش میان کاتیون و آنیون و شده و محاسبات فرکانس برای بدست آوردن ساختاری با حداقل انرژی انجام شد. محاسبه برهمکنش میان کاتیون و آنیون و پیوندهای هیدروژنی توسط محاسبات BSSE بدست آمد و سپس انرژی اتصال نیز با استفاده از انرژی تصحیح شده محاسبه گردید. بار اتمها نیز با استفاده از دستور B3LYP محاسبه شد.

۳-بحث و تحليل داده

با توجه به جدول ۱ تغییر آنیون از TFSI به FSI با کاهش اندازه آنیون تغییراتی نیز در انرژی این مایعات یونی رخ میدهد. کوچکتر شدن آنیون سبب کاهش انرژی پتانسیل ترکیبها میشود که این تغییر با کمتر شدن تعداد اتمهای سازنده قابل پیش بینی بود. هم چنین کاهش اندازه آنیون سبب کاهش انرژی اتصال میشود. انرژی اتصال میزان حلالیت و جاذبه میان نمک لیتیم و مایع یونی را نشان میدهد و هراندازه بزرگتر باشد، نمک لیتیم در مایع یونی بهتر حل شده است. همان گونه که مشاهده میشود، ترکیبات دارای یون TFSI انرژی اتصال بزرگتری دارند و این بدان معناست که نمک [LiTFS] بهتر از [LiTFS] در مایع یونی حل شده است. از همپوشانی اوربیتال اتمهای الکترونگاتیو آنیون با یون لیتیم میتوان به تحرک یون لیتیم پی برد. در ترکیبهای دارای ITSS یون لیتیم همپوشانی اوربیتال اتمهای الکترونگاتیو آنیون با یون لیتیم میتوان به تحرک یون لیتیم پی برد. در ترکیبهای دارای میگرد، اما از طرف دیگر سبب با آنیون و تحرک کمتر آن است. تحرک بیشتر یون لیتیم سبب رسانایی و هدایت یونی بیشتر میگرد، اما از طرف دیگر سبب

یون سولفونیوم دارای هیدروژنهایی با بار مثبت است، از این رو تمایل دارد که با اتمهای الکترونگاتیو آنیون همانند اکسیژن نیروی جاذبهای از نوع پیوند هیدروژنی تشکیل دهد. در کاتیون تری متیل سولفونیوم پیوند هیدروژنی با آنیون TFSI قویتر از پیوند هیدروژنی با آنیون FSI است، درحالی که در کاتیون تری اتیل سولفونیوم برعکس این موضوع صادق است. این اتفاق را میتوان به این دلیل دانست که پیوند هیدروژنی در [LiFSI][S222FSI]] با نیتروژن و در [IS222SI][S222SI]] با اکسیژن تشکیل میشود و بار اتم نیتروژن به طور قابل توجهای بیشتر از اتم اکسیژن است. با توجه به تغییر کاتیون نیز میتوان مشاهده کرد نتایج بالا برای کاتیون کوچکتر نیز صادق هستند و ترکیبهای دارای کاتیون تری متیل سولفونیوم انرژی اتصال، انرژی پتانسیل و همپوشانی اوربیتال لیتیم کمتری نسبت به کاتیون تری اتیل سولفونیوم دارند. جدول۱: ویژگیهای مایعهای یونی پایهی سولفونیوم با آنیون متفاوت

5 .	انرژی	انرژی	LPX→LP*Li	LP→BD*	<i>د</i> ۱۰	انرژى	انرژی	LPX→LP*Li	LP→BD*
نام ىركيب	پتانسيل	اتصال	(kj/mol)	(kj/mol)	نام ىر دىب	پتانسيل	اتصال	(kj/mol)	(kj/mol)
[LiTFSI][S111TFSI]	-4180.23	-159.86	59.20	4.10	[LiFSI][S111 FSI]	-3229.20	-119.47	58.44	3.43
[LiTFSI][S ₂₂₂ TFSI]	-4298.61	-126.97	62.46	7.79	[LiFSI][S ₂₂₂ FSI]	-3501.94	-90.54	56.31	8.71

۴–نتیجهگیری

مایعات یونی ترکیباتی هستند که از یون ساخته شدهاند و با تغییر کاتیون یا آنیون، میتوان به مایعات یونی با ویژگیهای قابل تنظیم دست یافت. در این مطالعه دو مایع یونی با کاتیون تری متیل سولفونیوم و تری اتیل سولفونیوم با آنیونهای FSI و TFSI مورد مطالعه قرار گرفت. آنیون FSI کوچکتر و از اتمهای کمتری ساخته شده است. نتایج بدست آمده نشان داد که کاهش اندازه آنیون سبب کاهش انرژی پتانسیل، انرژی اتصال، همپوشانی اوربیتال لیتیم و نیز ضعیفتر شدن پیوند هیدروژنی میگردد. میتوان گفت که یونهای کوچکتر انرژی اتصال بیشتری دارند و بهتر در مایعهای یونی حل میشوند.

منابع

[1] Bhattacharjee, A., Luís, A., Santos, J. H., Lopes-da-Silva, J. A., Freire, M. G., Carvalho, P. J. and Coutinho, J. A., (2014), Thermophysical properties of sulfonium-and ammonium-based ionic liquids", Fluid phase equilibria, 381, 36-45.

[2] Yoshio, M., Brodd, R. J. and Kozawa, A., (2009), Lithium-ion batteries" (Vol. 1, pp. 2-3) Springer, New York. [3] Manohar, C. V., Mendes, T. C., Kar, M., Xiao, C., Forsyth, M., Mitra, S. and MacFarlane, D. R., (2018), Jonic liquid electrolytes supporting high energy density in sodium-ion batteries based on sodium vanadium phosphate composites", Chemical communications, 54(28), 3500-3503.

[4] Mandai, T., Dokko, K. and Watanabe, M.,(2019), Solvate ionic liquids for Li, Na, K, and Mg batteries", The Chemical Record, 19(4), 708-722.

[5] Sampaio, A. M., Fileti, E. E. and Siqueira, L. J., (2019), Atomistic study of the physical properties of sulfonium-based ionic liquids as electrolyte for supercapacitors", Journal of Molecular Liquids, 296, 112065.

[6] Wongittharom, N.; Wang, C. H.; Wang, Y. C.; Yang, C. H.; Chang, J. K, (2014), Ionic liquid electrolytes with various sodium solutes for rechargeable Na/NaFePO4 batteries operated at elevated temperatures, ACS applied materials & interfaces, 6(20): 17564-17570



مطالعه جذب گاز گلخانهای ۲F4 در نانولوله کربنی با روش شبیهسازی مونت کارلو

وحید سخنوران^{(و*}، حدیثه عزیز تیموری^۲، بهزاد حقیقی^۳

۱ و ۰۰- استادیار، شیمی فیزیک، گروه فیزیک و شیمی، دانشکده علوم پایه و مهندسی، دانشگاه نیشابور رایانامه: sokhanvaran@neyshabur.ac.ir ۲- کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، گروه فیزیک و شیمی، دانشکده علوم پایه و مهندسی، دانشگاه نیشابور hadisehteymoori30@gmail.com ۲- استاد، شیمی فیزیک، گروه فیزیک و شیمی، دانشکده علوم پایه و مهندسی، دانشگاه نیشابور bhaghighi@neyshabur.ac.ir , ایانامه:

واژگان كليدى: جذب، گلخانەاى، شبيەسازى، نانولولە.

۱– مقدمه

توانش ایجاد گرمایش جهانی توسط گاز گلخانهای تترا فلورایدکربن (CF4) تقریباً ۵۷۰۰ برابر بیشتر از CO2 است. روشهای کاهش انتشار CF4 شامل: تجزیه اکسایشی، اکسایش کاتالیزوری و پلاسما، بازیافت از طریق کاهش، غلظت و همچنین جذب توسط نانومواد است [۱]. نانولولههای کربنی (CNTs) دسته مهمی از نانومواد بر پایه کربن هستند و دارای خواص مکانیکی، الکتریکی و حرارتی فوق العاده، مساحت ویژه بزرگ، وزن سبک، و قابلیت تکرارپذیری هستند [۲]. نانولولههای کربنی به سه شکل کایرال، زیگزاگ و صندلی وجود دارند. قطر نانولولههای کربنی تک جداره حدود ۲۰/ تا کمتر از ۳ نانومتر است [۳]. نانولولههای کربنی تک جداره بعنوان جاذب در بسیاری از کاربردها از جمله ذخیرهسازی گاز، حذف آلایندههای محیطی و غشاهای جداسازی کاربرد دارند [۴]. در شبیهسازی مونت کارلو همدماهای جذب و گرمای جذب، تصویر دقیق در مقیاس مولکولی، مکان ترجیحی و در نهایت مکانیسم جذب پیشبینی میگردد [۵].

۲- روش شبیهسازی

جذب CF4 با روش شبیه سازی مونت کارلو در مجموعه بندادی بزرگ با استفاده از برنامه MuSiC [۶] انجام شد. مولکول CF4 به صورت یک مولکول تک جایگاهی در نظر گرفته شد. برای برهمکنش های واندروالس بین اتم های نانولوله و گاز از پارامترهای پتانسیل لنارد جونز (LJ) استفاده شد. پارامترهای پتانسیل برای مولکول CF4 از مرجع [۷] گرفته شد. از قواعد ترکیبی لورنتس-برتوله برای محاسبه پارامترهای مولکولی مخلوط استفاده شد. تعداد کل گام های شبیه سازی ۲۰^۹ + ۲/۰ و مرحله تعادل سازی ۲۰^۹ + ۲/۰





شکل ۲: همدمای جذب گاز CF4 در نانولوله (۸و۸) تا فشار ۵۰ اتمسفر

مطابق شکل ۲ ملاحظه می شود که مقدار جذب گاز CF4 در نانولوله (۸و۸) در فشار ۵۰ اتمسفر حدود ۱۴ برابر فشار ۱ اتمسفر است و با افزایش فشار همچنان بر مقدار جذب افزوده می شود.

منابع و مراجع

[1] Cho, D. W., Kim, W. S., Chang, H., Jung, T. S., Park, J., & Park, J. H. (2017). Adsorption and desorption dynamics of CF₄ on activated carbon beds: Validity of the linear driving force approximation for pressure-changing steps. *Korean Journal of Chemical Engineering*, *34*, 2922-2932.



[2] Rahimi, M., Babu, D. J., Singh, J. K., Yang, Y. B., Schneider, J. J., & Müller-Plathe, F. (2015). Double-walled carbon nanotube array for CO₂ and SO₂ adsorption. *The Journal of Chemical Physics*, 143(12).

[3] Krishna, R. H., Chandraprabha, M. N., Samrat, K., Murthy, T. K., Manjunatha, C., & Kumar, S. G. (2023). Carbon nanotubes and graphene-based materials for adsorptive removal of metal ions–a review on surface functionalization and related adsorption mechanism. *Applied Surface Science Advances*, *16*, 100431.

[4] Sha, H., & Faller, R. (2016). Molecular simulation of adsorption and separation of pure noble gases and noble gas mixtures on single wall carbon nanotubes. *Computational Materials Science*, 114, 160-166.

[5] Düren, T., Bae, Y. S., & Snurr, R. Q. (2009). Using molecular simulation to characterise metal–organic frameworks for adsorption applications. *Chemical Society Reviews*, *38*(5), 1237-1247.

[6] Gupta, A., Chempath, S., Sanborn, M. J., Clark, L. A., & Snurr, R. Q. (2003). Object-oriented programming paradigms for molecular modeling. *Molecular Simulation*, *29*(1), 29-46.

[7] Peng, X., Vicent-Luna, J. M., & Jin, Q. (2020). Separation of CF₄/N₂, C₂F₆/N₂, and SF₆/N₂ mixtures in amorphous activated carbons using molecular simulations. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 12(17), 20044-20055.



مطالعه نظری گرمای جذب همپوششی (Q_{st}) گازهای سیلان، مونوکسیدکربن و هیدروژن روی گرافیت

وحید سخنوران^۱، نرگس محمدی^۲، بهزاد حقیقی^{۳و*}

۱ - استادیار، شیمی فیزیک، گروه فیزیک و شیمی، دانشکده علوم پایه و مهندسی، دانشگاه نیشابور رایانامه: sokhanvaran@neyshabur.ac.ir ۲ - کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، گروه فیزیک و شیمی، دانشکده علوم پایه و مهندسی، دانشگاه نیشابور

nargesmohammadi205@gmail.com رایانامه: ۳ و +- استاد، شیمی فیزیک، گروه فیزیک و شیمی، دانشکده علوم پایه و مهندسی، دانشگاه نیشابور رایانامه: bhaghighi@neyshabur.ac.ir

واژگان کلیدی: گرمای جذب، سیلان، مونت کارلو

۱– مقدمه

سیلان (SiH4) یکی از گازهای مهم مورد استفاده در روش رسوبدهی بخار شیمیایی (CVD) است [۱]. سیلان بعنوان پیش ماده رایج در سلولهای انرژی خورشیدی و ترانزیستور اثر میدانی فلز-اکسید-نیمه رسانا کاربرد دارد [۲]. سیلان در دمای اتاق بسیار واکنش پذیر است و با توجه به این ویژگی، در فرآوری فلز بسیار مورد توجه است [۳]. جذب گاز در مواد متخلخلی مانند کربن فعال، زئولیت، سیلیکاژل، چارچوبهای فلز-آلی و گرافن، با هدف ذخیرهسازی و جداسازی همواره مورد توجه محققین است [۴]. جذب گازها بر روی سطوح آلوتروپهای کربنی بر پایه گرافن مانند گرافیت همواره توجه زیادی را به خود جلب کرده است. این نانومواد در ذخیرهسازی انرژی، نانوالکترونیک، سنجش زیستی و غیره کاربرد دارند [۵]. ارزیابی فرآیند جذب معمولاً بر اساس دو ویژگی است، گرمای جذب و همدمای جذب. گرمای جذب نشاندهنده قدرت برهمکنش بین یک جذب شونده و جاذب است. این پارامتر را میتوان با توجه به گرمای آزاد شده در آزمایشهای تجربی (کالریمتری) یا از تجزیه و تحلیل همدماهای جذب محاسبه شده در دماهای مختلف که گرمای جذب همپوششی نامیده میشود، بدست آورد [۶].

۲- روش محاسبات

در این مطالعه از روش شبیهسازی GCMC برای بررسی جذب گازهای CO، H₂ و SiH4 در گرافیت استفاده گردید. شبیهسازیها شامل ۱۰۶ مرحله بود که نیمی از مراحل برای تجزیه و تحلیل دادهها استفاده شد. گرمای همپوششی جذب (Q_{st}) از معادله ۱ محاسبه شد.

(1)

 $Q_{st} = RT - \left(\frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \langle N \rangle}\right)$

که در این معادله $\langle V \rangle$ میانگین انرژی پتانسیل فاز جذب شده، $\langle N \rangle$ میانگین تعداد مولکول های جذب شده، T دما و R ثابت $\langle V \rangle$ این معادله $\langle V \rangle$ میانگین انرژی پتانسیل فاز جذب شده، T دما و R ثابت $\Delta H_{
m ads} = Q_{
m st}$ گاز ایدهآل است. $Q_{
m st}$ یک کمیت مثبت است و به طور خلاصه $Q_{
m st}$

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

۳- بحث و نتیجه گیری

دما همواره بر مقدار جذب و گرمای جذب تاثیر دارد. بنابراین گرمای جذب همپوششی برای جذب گازهای CO ،H2 و SiH4 در گرافیت در ۳ دما، شبیهسازی شد که در جدول ۱ آورده شده است.

		دما (K)	
	r9л	тіл	ттл
ڪاز	k	رمای جذب (cal/mol	5
H_2	r/99	٢/۶٢	Г/ГЛ
СО	0/9·	D/A 1	Δ/ΔΥ
SiH ₄	9/85	9/20	9/191

جدول ۱: گرمای جذب همپوششی گازهای هیدروژن، مونوکسیدکربن و سیلان در گرافیت

مطابق نتایج جدول ۱، ملاحظه می گردد که گرمای جذب همپوششی سیلان بیشتر از سایر گازها است. این نشان دهنده برهمکنش قوی تر بین SiH4 و گرافیت نسبت به CO و H2 است. همواره مقدار جذب با جذب مطلق مشخص می شود که تعداد کل مولکول های گاز جذب شده در سیستم جاذب را می شمارد. همدمای جذب شبیه سازی شده SiH4 در گرافیت در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: همدمای شبیهسازی شده گاز سیلان در گرافیت (دمای ۳۳۸ کلوین)

شکل ۱ نشان میدهد که همدمای جذب SiH4 در گرافیت از نوع I است. در ابتدا نمودار جذب شدیداً افزایش دارد و سپس با افزایش فشار ثابت میشود.



منابع و مراجع

[1] Hu, S. W., Wang, Y., & Wang, X. Y. (2003). Gas phase reactions between SiH₄ and B₂H₆: A theoretical study. *The Journal of Physical Chemistry A*, 107(10), 1635-1640.

[2] Smardon, R. D., & Srivastava, G. P. (2005). Ab initio surface reaction energetics of SiH₄ and Si₂H₆ on Si (001)-(2×2). *The Journal of Chemical Physics*, 123(17).

[3] Szafarska, M., Olszok, V., Holländer, U., Gustus, R., Weber, A. P., & Maus-Friedrichs, W. (2023). Gas phase reaction of silane with water at different temperatures and supported by plasma. *ACS omega*, 8(9), 8388-8396.

[4] Nuhnen, A., & Janiak, C. (**2020**). A practical guide to calculate the isosteric heat/enthalpy of adsorption via adsorption isotherms in metal–organic frameworks, MOFs. *Dalton Transactions*, *49*(30), 10295-10307.

[5] Abbaspour, M., Akbarzadeh, H., Salemi, S., & Sherafati, M. (**2016**). Molecular dynamics simulation of noble gas adsorption on graphite: New effective potentials including many-body interactions. *Journal of Molecular Liquids*, *222*, 915-922.

[6] Tun, H., & Chen, C. C. (2021). Isosteric heat of adsorption from thermodynamic Langmuir isotherm. *Adsorption*, 27(6), 979-989.


واژگان كليدى: Fe₃O₄/SBA-16-NH₂، فنوباربيتال، بارگيرى دارو، سيستم دارورسانى، پارامترهاى ترموديناميكى، نانوذرات مغناطسى.

۱– مقدمه

علم نانوتکنولوژی در صنعت داروسازی بسیار امیدوارکننده است، زیرا با استفاده از سیستمهای مدرن دارورسانی، داروها می می توانند بسیار قوی تر و مؤثر تر باشند. طراحی و ساخت سیستمهای رهاسازی کنترل شده دارو می تواند در مدیریت روشهای درمان دارویی بسیار مفید باشد. تاکنون مواد زیادی به عنوان سیستمهای دارورسانی معرفی شدهاند که مواد مزوپور یکی از آنهاست. مواد مزوپور به دلیل خواص منحصر به فرد خود مانند نسبت سطح به حجم بالا، اندازه منافذ قابل کنترل و همچنین از آنهاست. مواد مزوپور یکی از آنهاست. مواد مزوپور به دلیل خواص منحصر به فرد خود مانند نسبت سطح به حجم بالا، اندازه منافذ قابل کنترل و همچنین زیستسازگاری و تجزیه پذیری زیستی، به طور گسترده در زمینههای مختلف از جمله پزشکی مورد استفاده قرار گرفتهاند [1]. در میان مواد مزوپور، آ6-SBA به دلیل خواص سطحی مطلوب به سرعت مورد توجه قرار گرفت. 61-SBA گروهی از مواد مران مواد مزوپور، آ6-SBA به دلیل خواص سطحی مطلوب به سرعت مورد توجه قرار گرفت. 61-SBA گروهی از مواد مراد مواد مزوپور یکی از مواد مواد مزوپور، آ6-SBA به دلیل خواص سطحی مطلوب به سرعت مورد توجه قرار گرفت. آمار گروه ای غیر در مواد میند می می مختلف از جمله پزشکی مورد استفاده قرار گرفتهاند [1]. مواد مواد میلیکات سه بعدی شامل گروههای دار2 و هروهای هیدروکسیل سطحی است که با استفاده از کوپلیمرهای غیر متخلخل سیلیکات سه بعدی شامل گروه ای دارد و به گروه های هیدروکسیل سطحی است که با استفاده از کوپلیمرهای غیر مونی تهیه شده است. این ترکیب ساختاری مکعبی دارد و به گروه هضایی Im3m تعلق دارد.

۲-روشها

در این مطالعه نانوکامپوزیت مغناطیسی Fe₃O₄/SBA-16-NH₂ با استفاده از یک روش تک مرحلهای سنتز شد. سپس نانوکامپوزیت با استفاده از تکنیک الگوی پراش اشعه ایکس شناسایی شد. پس از تایید صحت ساختار سنتز شده، فنوباربیتال بر روی نانوکامپوزیت مغناطیسی Fe₃O₄/SBA-16-NH₂ بارگذاری شد و پارامترهای ترمودینامیکی مورد بررسی قرار گرفت.



۳-نتايج و بحث

شکل ۱ الگوی پراش اشعه ایکس نانوکامپوزیتهای Fe₃O4/SBA-16/NH₂ را نشان میدهد. الگوی XRD نانوذرات Fe₃O4/SBA-16/NH₂ سنتز شده، شش پیک متمایز را در زوایای پراش ۳۵[°]، ۳۵[°]، ۴۴[°]، ۵۴[°]، ۵۴[°] و ۳۶[°] نشان میدهند که به ترتیب مربوط به بازتاب صفحات (۲۲۰)، (۲۱۱)، (۴۰۰)، (۴۲۲) ، (۵۱۱) و (۴۴۰) از نانوذرات Fe₃O4/SBA-16/NH₂ کRD نانوذرات Fe₃O4/SBA-16/NH₂ یک پیک اضافی در حدود ۳۰-۲۰ = ۲۵ را نشان میدهد، که میتواند به وجود جزء سیلیسی آمورف نسبت داده شود، که به وضوح با حضور پوستههای سیلیس در محصول نهایی مطابقت دارد [۲].





شکل ۲ : نمودار ترمودینامیک بارگذاری داروی فنوباربیتال بر روی نانوحامل مغناطیسی Fe₃O₄/SBA-16-NH₂

R ²	ΔG° (Kj.mol ⁻¹)	ΔS° (Kj.mol⁻¹)	ΔH° (Kj.mol ⁻¹)	LnK	دما (كلوين)
	-λ/۶Y			37/47	۳۰۳
•/٩٩۴۴	-X/YY	-•/• FFTD	-77/•V	۲/٩۶	۳۱۳
	-Υ/Υλ			۲/۸۷	۳۲۳
	-V/۳۴			7/84	۳۳۳
	-8/88			۲/۳۶	۳۴۳

جدول ۱ : مقادیر پارامترهای ترمودینامیکی بارگذاری دارو

۴–نتیجهگیری

این مطالعه به منظور تعیین پارامترهای ترمودینامیکی نانوکامپوزیت مغناطیسی Fe₃O4/SBA-16-NH₂ به عنوان سیستم دارورسانی داروی فنوباربیتال انجام شد. نانوحامل مغناطیسی Fe₃O4/SBA-16-NH₂ با موفقیت با استفاده از یک روش تک مرحلهای سنتز شد. مطالعات ترمودینامیکی نشان داد که فرآیند بارگذاری دارو گرمازا و خودبهخودی است.

منابع

[1] Fekri, M. H., Soleymani, S., Razavi Mehr, M., & Saki, F. (2023). Removal of methyl orange dye from aqueous solutions by SBA-16 nano mesopore and optimization of effective parameters using response surface method. *Iranian Journal of Health and Environment*, *16*(2), 339-356.

[2] Fekri, M. H., Soleymani, S., Mehr, M. R., & Akbari-adergani, B. (2022). Synthesis and characterization of mesoporous ZnO/SBA-16 nanocomposite: Its efficiency as drug delivery system. *Journal of Non-Crystalline Solids*, *591*, 121512.

[3] Soleymani, S., Razavi Mehr, M., Fekri, M. H., & Saki, F. (2023). Modification of SBA-16 surface by-NH₂ group and its application as adsorbent. *Chemical Papers*, 77(9), 5129-5141.

[4] Fekri, M. H., Saki, F., Razavi-mehr, M., & Soleymani, S. (2023). Preparation of SBA-16 silicate nanoabsorbent by green method from reed plant stem, using it to remove Phenolphthalein pollutant and investigating effective factors by RSM method. *Applied Chemistry*, 18(68), 271-288.



پاسخ نوری غیرخطی نانوخوشههای تیتانیومکاربید: یک مطالعه نظری

حديثه سليمانى''*، اكبر اميدوار ً

hadisesoleimani77@gmail.com ا-گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان ۲- گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان a.omidvar@chem.ui.ac.ir

واژگان كليدى: پاسخ نورىغيرخطى، متالوكربوھيدرنھا، تيتانيومكاربيد، نظريه تابعى چگالى

۱– مقدمه

اپتیک غیرخطی به مطالعه پدیده هایی می پردازد که در نتیجه برهم کنش نور با ماده رخ می دهند. طراحی مواد جدید با پاسخ نوری غیرخطی در سه دهه اخیر به دلیل کاربردهای بالقوه آن ها در دستگاه های مختلف نوری و الکتریکی، توجه بسیاری را به خود جلب کرده است. [۱] در این راستا، مواد متفاوتی معرفی شده اند که مطالعه نانوخوشه های اتمی به علت ویژگی های منحصربه فردی مانند تغییر اندازه و هندسه، اهمیت ویژه ای داشته است. از این رو، تحقیقات تجربی و نظری فراوانی برروی کاربرد نانوخوشه ها به عنوان مواد با پاسخ نوری غیر خطی صورت گرفته است. نانوخوشه های تیتانیوم کاربید دسته ای از متالو کربوهیدرن ها (MmCn) هستند که از اتم های فلزات واسطه (M) و کربن (C) تشکیل شده اند. این مواد برای اولین بار در سال ۱۹۹۲ توسط گئو و همکارانش سنتز شدند. [۲–۳] این پژوهش به بررسی پاسخ نوری غیر خطی تیتانیوم کاربید (شکل ۱ نشان داده شده است. پرداخته است. ساختارهای بهینه شده نانوخوشه های تیتانیوم کاربید مور د بررسی در این پژوهش در شکل ۱ نشان داده شده است.

۲- روش

در این پژوهش محاسبات بهینه سازی و اندازه گیری پاسخ نوری غیرخطی تیتانیوم کاربیدها با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از نرم افزار گوسین (۰۹) انجام شده است. بهینهسازی نانوخوشههای تیتانیوم کاربید با استفاده از تابعی PBE با تصحیح DFT+D3 بههمراه مجموعههای پایه def2-TZVP برای اتم تیتانیوم و (bf)+6-31 برای اتم کربن انجام شده است.

۳- بحث و نتیجه گیری

میانگین طول پیوند بین اتمهای تیتانیوم در گستره ۲/۸۱ تا ۳٬۰۳ آنگستروم است. همچنین، فاصله بین اتمهای کربن تقریباً ۱/۳۵ آنگستروم است که با طول یک پیوند دوگانه معمولی (۱/۳۴ آنگستروم) قابل مقایسه است. خواص الکترونیکی نانوخوشههای تیتانیومکاربید در جدول ۱ آورده شدهاست. نتایج نشان میدهد که با افزایش اندازه نانوخوشه، میانگین قطبش پذیری (۵۵) در اکثر موارد افزایش مییابد. درحالی که بهدلیل تقارن مرکزی، ابرقطبشپذیری مرتبه اول (β۵) نانوخوشههای تیتانیوم کاربید Ti₈C₁₃ و Ti₁₄C₁₃ دقیقاً برابر صفر میباشد. با اینحال، ساختار Ti₁₁C₁₃ بیشترین ابرقطبشپذیری (۵۹[×] ۱۰^۶ ۵.۷) را در بین نانوخوشههای تیتانیومکاربید نشان میدهد؛ که به غیرمتقارن بودن این ساختار نسبت داده میشود. همچنین، این نانوخوشه کمترین شکاف انرژی (E_{H-L}) را دارد.

14.4



شکل ۱ : ساختارهای بهینهشده تیتانیوم کاربید (Ti_xC_y)

β۵) برای نانوخوشههای مورد مطالعه.	(α٫)، ابرقطبش پذیری اول	، میانگین قطبش پذیری	مدول ۱ : شکاف انرژی (E _{H-L})
-----------------------------------	-------------------------	----------------------	---

نانوخوشه	E _{H-L} (eV)	α _o (a.u)	β_0 (a.u)	نانوخوشه	E _{H-L} (eV)	α _o (a.u)	β_0 (a.u)	نانوخوشه	E _{H-L} (eV)	α _o (a.u)	$egin{array}{c} eta_0 \ (a.u) \end{array}$
Ti ₂ C ₂	•/44	47/07	1/04×1.4	Ti ₆ C ₁₃	۰/۸۵	41/22	۲/1۶×1۰۲	Ti ₁₂ C ₁₃	٠/٠٩	<i>४۶</i> /९९	۲/44×۱۰ ^۳
Ti ₃ C ₈	٠/٣٩	21/49	1/VT×1."	Ti ₇ C ₁₃	۰/۲۸	۵۲/۴۰	π/τ · ×) · π	Ti ₁₃ C ₁₃	٠/١٩	λτ/γτ	8/44×1.7
Ti ₄ C ₇	۰/۶۳	۲٩/۵۳	4/87×1.7	Ti ₈ C ₁₂	•/١١	۵۵/۰۵	۸/۰۴×۱۰۲	Ti ₁₄ C ₁₃	۰/۱۹	۸۵/۵۹	•/••
Ti ₄ C ₈	٠/۵٨	۳۰/۱۰	۸/۲۸×۱۰,	Ti ₈ C ₁₃	•/•۶	۵۸/۳۴	•/••	Ti ₁₇ C ₂	•/۲٧	۱۱۷/۰۰	4/48×1.7
Ti ₆ C ₁₀	۰/۵۱	42/01	$1/VI \times I \cdot L$	Ti ₁₁ C ₁₃	•/•۴	٩٢/٨٨	$\Delta/91 \times 1.5$	Ti ₁₉ C ₁₀	• /۳ ۱	189/40	1/24×1.°

منابع

[1] Omidvar, A. (**2018**). Design of a novel series of donor–acceptor frameworks via superalkali–superhalogen assemblage to improve the nonlinear optical responses. Inorganic Chemistry, 57(15), 9335-9347.

[2] Guo, B. C., Wei, S., Purnell, J., Buzza, S., & Castleman Jr, A. W. (**1992**). Metallo-carbohedrenes $[M_8C_{12}^+ (M=V, Zr, Hf, and Ti)]$: A class of stable molecular cluster ions. Science, 256(5056), 515-516.

[3] Cui, C., Zhang, H., Gu, Y., Geng, L., Jia, Y., Lin, S., & Luo, Z. (**2024**). Tailoring Titanium Carbide Clusters for New Materials: from Met-Cars to Carbon-Doped Superatoms. Journal of the American Chemical Society, 146(13), 9302-9310.



مطالعه رفتار الکتروشیمیایی و ابرخازنی کمپلکس کاتوسن خودانباشته بر روی الکترود فیبر کربنی

زهرا سمیعی'، سجاد دمیری^{۲*}، حمید رضا پور اعتدال^۳

۱ –دانشجوی دکتری شیمی تجزیه، دانشکده شیمی کاربردی، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، شاهینشهر، اصفهان،(M.c.z.samiei@gmail.com) ۲– نویسنده مسئول: دانشیار، دانشکده شیمی کاربردی، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، شاهین شهر، اصفهان، (SajjadDamiri@chmail.ir) ۳– استاد، دانشکده شیمی کاربردی، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، شاهین شهر، اصفهان، (Pouretedal@gmail.com)

۱– مقدمه

ابرخازنهای الکتروشیمیایی به دلیل دانسیته توان بالا و شارژ و دشارژ سریع، گزینه مناسبی برای ذخیرهسازی انرژی نسبت به باتریها هستند. این دستگاهها با مکانیسمهایی مانند ذخیرهسازی انرژی لایه دوگانه (EDLC) و واکنشهای شبهخازنی کار میکنند. مواد الکترودی مانند فروسن و کاتوسن به دلیل ویژگیهای الکتروشیمیایی عالی مورد توجه قرار گرفتهاند. کاتوسن، بهعنوان یک ماده ردوکسی مایع جدید، ظرفیت خازنی الکترودهای کربنی را افزایش میدهد. در این تحقیق، با لایههای خودانباشته کاتوسن روی الکترود میکروفیبر کربنی (CMF)، رفتار الکتروشیمیایی و ذخیره انرژی آن بررسی شده است.

۲-روش

الکترودها با پوششدهی و ایجاد فیلم نازکی از محلول کاتوسن در حلال DMF روی فیبر کربنی (Cat/CMF) تهیه شدند. الکترود آغشته به محلولها به مدت ۱۰ دقیقه در آون خشک شد تا فیلم کاتوسن بر روی سطح متخلخل فیبر تثبیت شود. اندازه گیریهای ولتامتری چرخهای (CV) در محلول الکترولیت ۱.۰ مولار Na2SO4 با سرعتهای روبش پتانسیل بین ۲۰ تا mV/s ۱۴۰ انجام شد. آزمونهای شارژ-دشارژ گالوانواستاتیک (GCD) در دانسیته جریانهای مختلف ثبت و ظرفیت خازنی ویژه طبق رابطه (۱) محاسبه شد.

(1)

$$C_{sp} = \frac{I \Delta t}{Am \Delta V}$$

۳- نتایج و بحث

جهت ارزیابی کیفیت و کمیت تشکیل فیلم کاتوسن بر روی سطح نسبتا متخلخل فیبر کربنی از تکنیک های مختلف میکروسکوپی الکترونی روبشی (SEM)، طیف سنجی پاشندگی انرژی اشعه X (EDS)، و ATR/FT-IR استفاده شد. تصاویر SEM و کیفیت توزیع عنصر Fe بر روی سطح با EDS در سطح الکترودهای Cat/CMF در شکل (۱) نشان داد که اتم های آهن در کاتوسن با غلظت نسبتا کم و توزیع تقریبا یکنواختی در تمام پنجره نقشه برداری عنصری توزیع شده اند.



شکل ۱. تصاویر SEM، نقشه توزیع عنصر آهن با روش EDS و طیف های آنالیز اتمی با EDS برای الکترود خالی میکروفیبر کربنی (بالا) و میکروفیبر کربنی با پوشش کاتوسن (پایین)

در این بخش، منحنیهای ولتامتری و شارژ-دشارژ گالوانواستاتیک (GCD) نمونهها در محدوده ۰.۰ تا ۰.۹ ولت بررسی شدند. مطابق شکل ۲-۵، الکترود میکروفیبر کربنی رفتار خازنی مشابه EDLC و الکترود Cat/CMF رفتار شبهخازنی نشان داد. ظرفیت ویژه (F/g) از منحنیهای دشارژ طبق رابطه ۱ محاسبه و در شکل (۲-۵ یا d) نمایش داده شد. با کاهش دانسیته جریان، زمان دشارژ افزایش یافت.



شکل ۵. a) مقایسه GCD الکترود Cat/CMF و فیبر کربنی بدون پوشش، b) منحنی های GCD الکترودها در دانسیته های جریان مختلف، c) ظرفیت ویژه وزنی (F/g) بر حسب دانسیته جریان و d) ظرفیت ویژه الکترودها بر واحد سطح الکترود

همچنین نمودارهای دانسیته انرژی بر حسب دانسیته توان (نمودار راگون) و تستهای پایداری سیکلی الکترود اصلاح شده در دانسیته جریان ۱/۱ A/g برای ۳۰۰۰ سیکل شارژ-دشارژ انجام شد. در دانسیته جریان ۱/۱ A/g، رفتار ابرخازنی کاتوسن دارای دانسیته انرژی ۲/۵ Wh/kg در دانسیته توان ۳۷۳/۸ W/kg می باشد.

۴- نتیجهگیری

A/g به طور خلاصه، در این تحقیق رفتار ابرخازنی الکترود Cat/CMF نشان داد که ظرفیت ویژه الکترود در دانسیته جریان A/g . ۱۸۵۰ برابر ۳۹/۷۶ F/g است. در یک سطح ثابت از الکترود ظرفیت خازنی الکترود Cat/CMF برابر ۱۸۰ mF/cm² و برای الکترود CMF با رفتار EDLC تقریبا ۳F/cm² است. در دانسیته جریان ۱/۱ A/g، رفتار ابرخازنی کاتوسن دارای دانسیته انرژی ۲/۵ Wh/kg در دانسیته توان ۳۷۳/۸ W/kg می باشد. همچنین با افزایش دانسیتههای توان، مقادیر دانسیته انرژی روند نزولی دارد. ظرفیت کلی خازنها در شارژ-دشارژهای متوالی، تا ۳۰۰۰ سیکل نشان میدهند که ظرفیت الکترود Cat/BPPG تقریبا ۳۰٪ کاهش می یابد.

منابع

Sharma S., Chand P. (2023). Supercapacitor techniques: A brief review. Results in Chemistry.
 Shaikh N. S., Ubale S. B., Mane V. J., et al. (2022). Novel electrodes for supercapacitors. Journal of Alloys and Compounds.



تجزیه و تحلیل جبهههای خودکاتالیستی در هندسه شعاعی برای سامانه یدات- اسید آرسنیوس(IAA)

مریم سیدشریفی^{او*}، آنه دو ویت^۲

n.seyedsharifi@gmail.com ا- دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشگاه زنجان ۲-استاد تمام ، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک غیرخطی، دانشگاه لیبرال بروکسل anne.de.wit@ulb.be

واژگان کلیدی: جبهههای خودکاتالیستی، هندسه شعاعی، واکنش ساعتی

۱– مقدمه

اگرت و شارنو برای اولین بار اکسیداسیون اسیدی آرسنیت توسط یدات را به صورت خودکاتالیست بررسی نمودند(۱). این واکنش یک مطالعه کلاسیک از واکنش لندولت و سیستمهای مرتبط است، که به صورت تجربی و نظری مورد مطالعه قرار گرفته است(۲ و ۳). واکنش با دو فرآیند کلی با قوانین تجربی نشان داده می شود. ابتدا کاهش یدات توسط یدید برای ایجاد ید در واکنش داشمن است

 $\mathrm{IO}_3^- + 5\mathrm{I}^- + 6\mathrm{H}^+ \rightarrow 3\mathrm{I}_2 + 3\mathrm{H}_2\mathrm{O}$

 $-\frac{[IO_{\bar{3}}]}{dt} = +\frac{[I^-]}{dt} = (k_a + k_b[I^-])[I^-][IO_{\bar{3}}][H^+]^2$

فرآیند داشمن مرحله تعیین کننده سرعت است پس داریم (۲)

۲- روش انجام

(1)

در محلول بافر غلظت H^+ ثابت است پس $k_1 = k_a [H^+]^2$ و $k_2 = k_b [H^+]^2$ و $y = IO_3^-$ خود کاتالیست با $X = I^-$ نشان داده می شوند

$$\frac{\partial x}{\partial t} = (k_1 + k_2 x) x y$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -(k_1 + k_2 x) x y$$
(f)

سرعت مواد شیمیایی با $V_r = Q/r$ نشان داده میشود. V_r با واکنش اصلاح نمیشود و جابجایی آن از نظر هیدرودینامیکی پایدار است و هندسه شعاعی را حفظ میکند. یعنی متغیرها فقط به مختصات شعاعی r و به زمان t بستگی دارند. در مختصات استوانه ای، (r, θ, z) معادلات حاکم بر این دینامیک عبارتند از

$$\partial_{t^{*}} x^{*} + V_{r^{*}} \partial_{r^{*}} = D_{X} (\frac{1}{r} \partial_{r^{*}} + \partial_{r^{*}}^{2}) x^{*} + (k_{1} + k_{2} x^{*}) x^{*} y^{*}$$
⁽⁵⁾

$$\partial_{t^{*}}y^{*} + V_{r^{*}}\partial_{r^{*}} = D_{Y}(\frac{1}{r}\partial_{r^{*}} + \partial_{r^{*}}^{2})y^{*} - (k_{1} + k_{2}x^{*})x^{*}y^{*}$$
(6)

پس از کمی ساده سازی و با در نظر گرفتن اینکه ضرایب نفوذ برابر نیستند، داریم

$$\partial_t \mathbf{x} + \mathbf{V}_r \partial_r \mathbf{x} = \beta \left(\frac{1}{r} \partial_r + \partial_r^2\right) \mathbf{x} + (\mathbf{x} + \mathbf{d}) \mathbf{x} \mathbf{y}$$
^(V)
^(A)

صفهان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

$$\partial_t y + V_r \partial_r y = \left(\frac{1}{r}\partial_r + \partial_r^2\right) y - x(x+d) x y$$

$$V_r = Q/r \quad \beta = \frac{D_X}{D_r}$$

$$A_r = Q/r \quad \beta = \frac{D_X}{D_r}$$

$$\frac{x_i^{n+1} - x_i^n}{\Delta t} = -\frac{Q}{i} \frac{x_{i+1}^n - x_{i-1}^n}{2\Delta r} + B \left[\frac{1}{r_i} \frac{x_{i+1}^n - x_{i-1}^n}{2\Delta r} + \frac{x_{i+1}^n - 2x_i^n + x_{i-1}^n}{\Delta r^2} \right] + (x_i^n + d) x_i^n y_i^n \tag{9}$$

$$\frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\Delta t} = -\frac{Q}{i} \frac{y_{i+1}^n - y_{i-1}^n}{2\Delta r} + \left[\frac{1}{r_i} \frac{y_{i+1}^n - y_{i-1}^n}{2\Delta r} + \frac{y_{i+1}^n - 2y_i^n + y_{i-1}^n}{\Delta r^2}\right] - (x_i^n + d) x_i^n y_i^n \tag{1}$$

محاسبات عددی با کدنویسی در نرم افزار C و با شرایط $t_{max} = 200$ و $r_{max} = 500$ و y(r,0) = 1 با شرایط اولیه $t_{max} = 200$ و محاسبات عددی با کدنویسی در نرم افزار C و با شرایط $x(r_0,t) = y(r_{max,t}) = 1, x(r_{max},t) = y(r_0,t) = 0$. شرایط مرزی x(r,0) = 0

۳- نتايج

نمودار غلظتهای عددی برای x و y در زمانهای انتخاب شده پیشرفت واکنش را نشان میدهد(شکل ۱). تکامل زمانی جبهه واکنش (rf) در Q های مختلف نشان میدهد که سرعت جبهه واکنش در حال افزایش است. شیب نمودار(شکل ۲) در Q های مختلف سرعت جبهه واکنش را نشان میدهد.



شکل ۱ : پروفایل غلظت عددی x و y در t=32 در Q های مختلف



شکل ۲ : جبهه نفوذ واکنش در Q های مختلف

۴- نتیجه گیری

معادله واکنش- انتشار- فرارفت برای تکامل مکانی-زمانی جبهه یدات- آرسنیوس اسید (IAA) در هندسه شعاعی حل شد. این واکنش مدل خوبی برای مطالعه واکنشهای ساعتی است. در این کار جبهه واکنش- انتشار- فرارفت و خودکاتالیستی به صورت نظری مورد مطالعه قرار گرفت. تکامل زمانی جبهه واکنش (rf) در Q مختلف نشان میدهد که با افزایش Q سرعت جبهه نیز افزایش مییابد.

منابع و مراجع

[1] Eggert, J., Scharnow, B. Z. Elektrochem, 27: 457-70, 1921.

[2] A. De Wit. Miscible density fingering of chemical fronts in porous media: Non-linear simulations. Physics of Fluids, 16(1):163-175, 2004.

[3] George A. Papsin, Adel Hanna, and Kenneth Showalter. Bistability in the iodate oxidation of arsenous acid. The Journal of Physical Chemistry, 85(17):2575-2582, 1981.



اوزونوليز تيوفن: مطالعه محاسباتي سازوكار واكنش

مريم سيدشريفى

*۱- دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشگاه زنجان m.seyedsharifi@gmail.com

واژگان کلیدی: اوزونولیز، تیوفن، شیمی اتمسفری

۱– مقدمه

اوزون یکی از ترکیبات مهم اکسید کننده است که نقش بسزایی در حذف آلایندههای تروپوسفر در طول روز و شب دارد(۱ و ۲). افزودنO3 به پیوند دوگانه(های) هیدروکربنهای غیراشباع در یک سیکلوافزودن هماهنگ [۲+۳] یک حلقه میانی پنج عضوی ایجاد میکند که یک اوزونید اولیه با ارتعاش برانگیخته است. این واکنش گرمازا است و انرژی اضافی منجر به تجزیه اوزونید اولیه می شود. در نهایت واکنش منجر به تولید آلدئیدها / کتونها و / یا اسیدهای مرتبط به نامCriegee Intermediates (CI) می شود که می تواند در معرض تجزیه تک مولکولی، ایزومریزاسیون یا تثبیت در اثر برخورد با مولکولها قرار گیرد(۳). تیوفن و مشتقات آن یکی از مهم ترین هتروآروماتیکها هستند. آنها از طریق فرآیندهای مختلفی مانند احتراق ناقص سوختهای فسیلی، محصولات تقطیر نفت، تزریق گاز به زغال سنگ، سوزاندن گیاهان و سایر زیست توده ها، انتشارات آتشفشانی به اتمسفر اسطع می شوند و همچنین بر روی مناطق جلبک دریایی شناسایی شده است (۴). ما در مورد ارتباط بین دیدگاههای نظری و ارتباط جوی واکنش رادیکال تیوفن به علاوه اوزون در فاز گاز بحث خواهیم کرد.

۲- روش انجام

واکنش تیوفن با اوزون (C4H4S + O3) بررسی شدهاست. ساختار کلیهی گونههای درگیر در این واکنش با روش 2X-M06 واکنش با مجموعه پایهی، (C4H4S + O3) با مجموعه پایهی، (G4H4S + O3) با مجموعه پایهی، (G4H4S + O3) با مجموعه پایهی، (G4H4S + O3) با محموعه پایه محموعه پایهی، (G4H4S + O3) با محموعه پایهی، (G4H4S + O3) با محموعه پایه محموعه پایهی، (G4H4S + O3) با محموعه پایه محموع با محموعه پایه محموعه پایه محموعه پایه محموعه پایه محموع پایه محموع پایه محموع پایه محموع پایه محموع با محموع پایه محم پاده محموع پایه محموع پا

۳- نتايج

در حالتهای گذار ۱ و ۲ اضافه شدن اوزون به پیوند دوگانه حلقه تیوفن را داریم و دو حدواسط CI در این حالتها تشکیل می شود. حالت گذار شمارهی۱ با سد انرژی کوچکتر کمپکلس ۱ را تشکیل میدهد و از لحاظ سینتیکی این حالت گذار پایدارتر است. از سوی دیگر حالت گذار ۲ با تشکیل کمپلکس ۲ محصول پایدار ترمودینامیک این واکنش را تشکیل میدهد. در ادامه نیز هریک از این کمپلکسها با نوآرایی و ادامه واکنش محصولات دیگر تولید میکنند.



۴- نتیجهگیری

اکسیداسیون هیدروکربنهای هتروآروماتیک به دلیل نقش مهم این ترکیبات در فرآیندهای احتراق، شیمی اتمسفر، تولید باران اسیدی و آلودگی فتوشیمیایی هوا به طور فزاینده ای مورد مطالعه قرار گرفته است. در این کار، ازونولیز تیوفن با روش DFT بررسی شده است. هندسه همه گونه ها در m062x/6-31+g(d,p) بهینه شده است. دو کمپلکس CI در این مطالعه به دست آمد.



منابع و مراجع

- 1. Krupa, S. V., and Manning, W. J. (1988) Atmospheric ozone: Formation and effects on vegetation, *Environmental Pollution 50*, 101-137.
- 2. Kasting, J. F., and Donahue, T. M. (1980) The evolution of atmospheric ozone, *Journal of Geophysical Research: Oceans* 85, 3255-3263.

3. Criegee, R. (1975) Mechanism of Ozonolysis, Angewandte Chemie International Edition in English *14*, 745-752. *English 14*, 745-752.

[£]. F. Al-Shahrani; T. Xiao; S. A. Llewellyn; S. Barri; Z. Jiang; H. Shi; G. Martinie; M. L. H. Green, Applied Catalysis B: Environmental 73 (3–4) (2007) 311-316



بررسی pH و زمان واکنش بر عملکرد فوتوکاتالیستهای La@V2O5/TiO2 و Sn@CaO/TiO2 در حذف مالاشیت گرین

فاطمه شبانی^۱، نسترن پارسافرد^{آو*}

۱ -دانشجوی کارشناسی، شیمی کاربردی، گروه شیمی کاربردی، دانشکده علوم پایه و فنی مهندسی و دانشگاه کوثر، Email:ndastmoozeh@yahoo.com ۲و*-دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی کاربردی، دانشکده علوم پایه و فنی مهندسی و دانشگاه کوثر، -Email:n parsafard@kub.a.ir

واژگان كليدى: مالاشيت گرين، رنگدانه، عملكرد فوتوكاتاليستى، پسابها.

۱– مقدمه

رنگدانه مالاشیت گرین یکی از انواع مهم آلایندههای شیمیایی است که به دلیل مقاومت نسبتاً بالا در برابر روشهای حذف سنتی، چالش های زیادی برای محیط زیست ایجاد می کند. این نوع آلایندهها به دلیل وجود گروههای فنولیک و کتونیک، مقاومت بالایی در برابر اکثر روشهای حذف دارند و میتوانند اثرات نامطلوب بر زندگی انسانها و محیط زیست داشته باشند. از جمله این روشها، استفاده از سیستمهای فوتوکاتالیستی است که از خواص مواد نانومتری استفاده میکنند. این سیستمها به دلیل توانایی خود در تبدیل انرژی الکترونی به انرژی شیمیایی، قابلیت حذف سریع و مؤثری از آلایندههای شیمیایی را دارند [۱]. فوتوكاتالیزاسیون به دو نوع تقسیم میشود: فوتوكاتالیزاسیون همگن: در این روش، كاتالیزور و واكنش دهنده در همان فاز قرار دارند. فوتوکاتالیزاسیون ناهمگن: در این روش، کاتالیزور و واکنش دهنده در فازهای مختلف قرار دارند. معمولاً کاتالیزور یک ماده جامد است، در حالی که واکنش دهندهها در حالت مایع یا گازی هستند. این نوع از فوتوکاتالیزاسیون شامل جذب نور توسط كاتاليزور، توليد جفتهاي الكترون-حفره و واكنشهاي كاهش-افزايش با گونههاي آغشته شده بر سطح كاتاليزور است [7]. سیستم La@V2O5/TiO2 یکی از نمونههای سیستمهای فوتوکاتالیستی است که در زمینه حذف آلایندههای شیمیایی از محيطهاي آبي مورد مطالعه قرار گرفته است. در اين سيستم، نانومواد لانتانيوم با اكسيد وانديوم پنتاكسيد تركيب شدهاند كه به دلیل خاصیتهای فوتوکاتالیزوری بالا، در حذف آلایندههای شیمیایی از محیطهای آبی کاربرد دارند [۱]. سیستم Sn@CaO/TiO₂نیز یکی دیگر از نمونههای سیستمهای فوتوکاتالیستی است که در زمینه حذف آلایندههای شیمیایی از محيطهاي آبي مورد مطالعه قرار گرفته است. اين سيستم از تركيب نانومواد سنيومي با اكسيد كلسيم و اكسيد تيتانيوم تشكيل شده است که میتواند به عنوان یک کاتالیزور برای تبدیل انرژی الکترونی به انرژی شیمیایی عمل کند [۳]. این مقاله همچنین به تکمیل دانش در مورد مکانیسمهای فوتوکاتالیزوری و تأثیر پارامترهای مختلف بر عملکرد این سیستمها کمک میکند.

۲- نتایج و بحث

بررسیهای انجام شده نشان میدهند که هر دو سیستم فوتوکاتالیستی La@V2O5/TiO2 و Sn@CaO/TiO2 در حذف مالاشیت گرین از پسابها مؤثر هستند. بررسیهای انجام شده نشان میدهند که عملکرد فوتوکاتالیستی با افزایش زمان بهبود مییابد. این اثر میتواند است به دلایل زیر مربوط باشد، افزایش تعداد ذرات فعال سطحی: با افزایش زمان، ذرات کاتالیستی بیشتری فعال میشوند و بنابراین سطح فعال برای واکنش افزایش مییابد. تکمیل واکنشهای فوتوکاتالیستی: واکنشهای فوتوکاتالیستی، معمولاً چند مرحلهای هستند. با افزایش زمان، احتمالاً تمام مراحل واکنش تکمیل میشوند. تغییرات در ساختار کریستالی کاتالیستی معمولاً چند مرحلهای هستند. با افزایش زمان، احتمالاً تمام مراحل واکنش تکمیل میشوند. تغییرات در ساختار کریستالی کاتالیست تغییر کند که منجر به بهبود عملکرد شود. ایجاد گونهای اکسیترای کاتالیست تغییر کند که منجر به بهبود عملکرد شود. ایجاد گونههای اکسیژن فعال ایستری تولید شوند که منجر به بهبود عملکرد شود. ایجاد مرکت می کنیستالی کاتالیست: ممکن است با افزایش زمان، ساختار کریستالی کاتالیست تغییر کند که منجر به بهبود عملکرد شود. ایجاد مرکت می کنید. این عملکرد در 11 PH بیشترین مقدار خود را دارد که میتواند به این دلایل مربوط باشد: تغییر در وضعیت ابرسانی بار الکتریکی: این عملکرد در 11 PH بیشترین مقدار خود را دارد که میتواند به این دلایل مربوط باشد: تغییر در ساختار سرحمی کناد می تراین مربوط باشد: تغییر در سختار مرکت می کنند. این عملکرد در 11 PH بیشترین مقدار خود را دارد که میتواند به این دلایل مربوط باشد: تغییر در ساختار سطحی کاتالیست ایجاد کند. تغییر در ساختار سطحی کاتالیست بار الکتریکی بهتری برای کاتالیست ایجاد کند. تغییر در ساختار سطحی کاتالیست به گونهای تغییر کند که واکنشهای فوتوکاتالیستی تقویت یابند. سرای تولید گونههای اکسیژن فعال ایجاد شرایط بهینه می واکنشهای فوتوکاتالیستی افزایش یابد. ایجاد شرایط بهینه مرای تولید گونههای اکسیژن فعال ایجاد شود. بررسیهای انجام شرای واکنشهای فوتوکاتالیستی میاند. این تولید گونههای اکسیژن فعال ایمرن ممکن است شرایط بهینهای برای تولید گونههای اکسیژن فعال ایجاد شود. بررسیهای انجام شده نشان می دهند که کاتالیست محکن است شرایط بهینه ای برای تولید گونههای اکسیژن فعال ایجاد شود. بررسیهای انجام شده نشان میدهند که کاتالیست یا کاتالیست به کاتالیست واکنههای اکرور بهتری داند. در مرای تولید گونههای اکسیژن فعال ایجاد شود. بررسیهای انجام شده نشان می دهند که کاتالیست یا کاتالیست به کاتالیست به کاتالیست واکنههای اکرور کاره. میوا یا کاری کاره کاره ی در مری





۹- نتیجهگیری

بررسیها نشان دادند که عملکرد فوتوکاتالیستی با افزایش زمان بهبود مییابند. حداکثر عملکرد در PH 11 رخ میدهد. کاتالیستهای حاوی کلسیم نسبت به کاتالیستهای حاوی وانادیم عملکرد بهتری نشان میدهند. این یافتهها تأیید میکنند که انتخاب مناسب سیستم فوتوکاتالیستی برای حذف رنگدانههای خاص از پسابها نیازمند در نظر گرفتن عوامل متعددی مانند زمان اثر، PH محیط، و ترکیب شیمیایی کاتالیست است. طراحی کاتالیستهای بهینه با ترکیبی مناسب از کلسیم و وانادیم میتواند به حذف کاتالیستی رنگدانه مالاشیت گرین از پسابهای صنعتی کمک شایانی کند.



منابع و مراجع

[1] Parsafard, N., & Shoorgashti, Z. (2024). The effect of transition metal oxides in the La/TiO₂ structure for the photocatalytic degradation of malachite green under UV and visible light irradiation. Applied Water Science, 14(10), 220.

[2] Khan, S., Noor, T., Iqbal, N., & Yaqoob, L. (2024). Photocatalytic Dye Degradation from Textile Wastewater: A Review. ACS omega.

[3] Parsafard, N., Abedi, R., & Moodi, H. (2024). Ternary tin-doped titanium dioxide/calcium oxide (Sn-TiO₂/CaO) composite as a photocatalyst for efficient removal of toxic dyes. RSC advances, 14(28), 19984-19995.



بررسی جذب داروی های آزولی بر گرافن و گرافن اکسید از طریق محاسبات کوانتمی

خدیجه شکوهی^{۲*،۱}، احمدرضادژم ³

sh.shekoohi@gmail.com ا، السلامی واحد داراب sh.shekoohi@gmail.com ا، الملامی واحد داراب ۲- مرکز تحقیقات مهندسی شیمی ،نفت و پلیمر ،دانشگاه آزاد اسلامی ،واحد شیراز ۳- شیمی آلی، گروه شیمی ،دانشگاه آزاد اسلامی واحد داراب dejam.ahr@gmail.com

واژگان كليدى: نانوحامل، آناسترازول ، لتروزول ، تئورى تابعى چگالى

۱–مقدمه

آناسترازول و لتروزول از مشتقات دارویی آزولی و به عنوان داروهای ضد سرطان عمل می کنند که مکانیسم آنها از طریق غیر فعال سازی سیتو کروم p450 می باشد(۱). اتم های نیتروژن در گروه های تری آزول خصلت هسته دوستی داشتند و با آنزیم آروماتاز تشکیل کمپلکس بازدارنده می دهند با توجه به عوارض جانبی داروهای سرطان در سیستم دارورسانی جدید از حامل های دارو استفاده می شود (۲)نانوحاملها با تغییر خصوصیات فارماکوکینتیک دارو باعث بهبود عملکرد دارو وکاهش عوارض جانبی آن میشوند(۳). دراین پژوهش با محاسبات تئوری تابعی چگالی، جهت بررسی میزان جذب داروی ضد سرطان آناسترازول و لتروزول بر روی نانو حامل گرافن و گرافن اکسید با استفاده ازنرم افزارگوسین مورد بررسی قرار گرفت.

۲- روش

ساختار های اولیه توسط برنامه Gauss view05رسم شدو محاسبات با استفاده از نرم افزار Guassian 09در سطح B3LYP و مجموعه پایه (d)31G(d) و در فاز گازی انجام شد. برای انجام محاسبات محدودیتی بر روی کل سیستم اعمال نشده است، بنابراین جذب دارو ها بر نانوحامل ها بر اساس بهینه سازی انرژی کل سیستم می باشد. انرژی جذب دارو بر روی نانوحامل، و انرژی بالاترین وپایین ترین اربیتال مولکولی محاسبه شد.

۳- بحث و نتيجه گيري

ساختار آناستروزول و لتروزول وگرافن و گرافن اکسید به صورت ایزوله (تک) در فاز گازی بهینه شد، ساختار های ایزوله بهینه شده در شکل ۱ نمایش داده شده است.سپس دارو ها را در فاصله ۶ آنگستروم در راستای سطح صفحه ها قرار دادیم. در نهایت در ساختار بهینه شده فاصله داروها از صفحه در حدود ۳.۶۳ آنگستروم است.



شكل ۱: ساختار بهينه شده الف)آناستروزول ب)لتروزول ج)گرافن اكسيد د) گرافن

جهت گیری آناستروزول و لتروزول بر روی صفحه به گونه ای هست که حلقه آزولی آنها از صفحه دورترقرار می گیرد نسبت به نیتروژن هایی است که به کربن پیوند دارند. در شکل ۲ ساختاربهینه شده ترکیب داروی جذب شده بر سطح گرافن(G)و گرافن اکسید(GO) نمایش داده شده است. گرافن اکسید(GO) نمایش داده شده است. از ساختار هندسی سیستم دارو و صفحات بهینه شده می توان انرژی جذب هر کدام از دارو ها بر روی سطح را محاسبه کرد. انرژی جذب بر طبق فرمول زیر حساب می شود:

 $\Delta E_{abs} = E[sheet + drug]_{opt} - [E[sheet]_{opt} + E[drug]_{opt}]$ (1)



شکل ۲ : ساختاربهینه شده ی کمپلکس دارو و نانوحامل

میزان انرژی جذب دارو بر صفحه گرافن اکسید بیش از گرافن است و لتروزول در هر دو مورد با انرژی بیشتری جذب صفحه نانو می شود . مقدار انرژی اربیتالهایHOMO و LUMO و شکاف انرژی (Δ*E_{LUMO-HOMO}*) برای ترکیبات محاسبه شد و در جدول ۲ برای گونه های مورد مطالعه در فاز گازی گزارش شده است. جدول ۱: انرژی جذب دارو ها بر روی سطح نانو صفحه

Adsorption energy(KJmol-1)							
Graphene Graphene Oxide							
Anastrazole	Letrazole	Anastrazole	Letrazole				
-14.137	-15.784	-36.454	-49.638				

جدول ۲: انرژی اربیتال HOMO و LUMO برای دارو ها و صفحات کربن و سیستم داروی جذب شده در فاز گازی (واحد انرژی اربیتال ها ev).

System	E _{HOMO}	E _{LUMO}	$\Delta E_{\rm L-H}$
Anastrozole	-7.2121	-0.9842	6.2279
Letrozole	-7.4331	-2.1255	5.3076
Graphene	-4.9345	-2.1094	2.8251
Graphene oxide	-4.3998	-2.8142	1.5856
G+anastrozole	-5.0417	-2.2368	2.8050
G +letrozole	-5.0376	-2.2253	2.8123
GO+anastrozole	-4.700	-2.3370	2.3630
GO +letrozole	-4.5214	-2.9524	1.5690

انرژی HOMO فاکتور مهمی در تشکیل کمپلکس آنزیم بازدارنده می باشد. افزایش انرژی اربیتال HOMO تمایل گونه را به عنوان هسته دوست افزایش می دهد، نتایج حاصل در این تحقیق نشان می دهد که وقتی دارو بر سطح صفحه جذب می شود انرژی HOMO افزایش داریم که این نشان دهنده موثرتر شدن عملکرد داروی جذب شده می باشد، میزان افزایش انرژیHOMO در جذب لتروزول بر صفحه گرافن اکسید بیش از سایر موارد بود. با جذب داروها عملکرد آنها سریعتر می شود این می تواند مقدار دوز مصرفی را پایین آورده در نتیجه اثرات جانبی داروی آناستروزول و لتروزول را کاهش می دهد.

منابع

[1] K. K. Vekariya, J. Kaur, K. Tikoo, (2013). Alleviating anastrozole induced bone toxicity by selenium nanoparticles in SD rats Toxicol. Appl. Pharmacol., 268, 212

[^Y] M. Saeedi, M. Eslamifar, K. Khezri, S.M. Dizaj, (2019) Applications of nanotechnology in drug delivery to the central nervous system, Biomedicine & Pharmacotherapy. 111 666–675

[3] Goenka, S., Sant, V., Sant, Sh. (2014). Graphene-based nanomaterials for drug delivery and tissue engineering Journal of Controlled Release, Vol. 173, p. 75



تهیه نانوکامپوزیت با درجه تخلخل متفاوت از زیست توده بر پایه مس اکسید

سودابه سيفى

استادیار، شیمی تجزیه، گروه صنایع شیمیایی، دانشگاه ملی مهارت sseifi@tvu.ac.ir

واژگان كليدى: زيست توده، نانوكامپوزيت، ميزان تخلخل، سطح ويژه

۱– مقدمه

در تهیه نانوکامپوزیت باید به موارد مختلفی توجه شود. از جمله این موارد شرایطی است که در آن نانوکامپوزیت تولید می شود تا شرایط به گونهای فراهم شود که در طی آن نانومواد مورد استفاده به عنوان سازگارکننده بتوانند خاصیت تقویت کنندگی خودشان را به بهترین شکل ممکن نشان دهند. در این تحقیق نانوکامپوزیت با درجه تخلخل متفاوت از زیست توده ونوشک بر پایه مس اکسید تهیه گردید. نانوذرات و نانوگل های اکسید مس ابتدا تهیه و سپس بر روی کربن فعال حاصل از زیست توده (ونوشک) نشانده شد. با توجه به تفاوت اندازه و تخلخل نانوساختارهای اکسید مس بعد از نشاندن بر روی کربن، نانوکامپوزیت هایی با خواص متفاوت به دست آمد. نتایج میکروسکوپ الکترونی پویشی (SEM) تفاوت ساختارو پراکنش غیر یکنواختی از نانو ساختارهای اکسیدمس را بر سطح کربن فعال نشان داد. نتایج آزمایش الگوی پراش اشعه X نیز حضور نانو ساختارهای مس بر روی سطح کربن فعال را مورد تایید قرار داد. نتایج آنالیز BET توزیع اندازه حفرات کربن فعال را نوساختارهای مس اکسید و

۲- روش

۲-۱ تولید کربنفعال از زیست توده (ونوشک)

ابتدا خرد کردن دانهها در هاون و سپس آسیاب کردن آنها انجام شد. پودر بهدست آمده برای جداسازی پوسته و حذف روغن موجود در هسته در نیتریک اسید به مدت ۳ ساعت نگهداری شد. پس از این مرحله برای حذف مواد مزاحم و اسید اضافی شستشو چندین بار توسط آب مقطر صورت گرفت. پس از این مرحله با اضافه کردن پتاسیم هیدروکسید یک مولار ماده به مدت ۳ روز در این محلول قرار گرفت. محصول این مرحله ابتدا توسط آب مقطر به مدت ۳ روز در این محلول قرار گرفت. محصول این مرحله ابتدا توسط آب مقطر به مدت ۲ ساعت نگهداری شد. پس از این مرحله برای حذف مواد مزاحم و اسید اضافی شستشو چندین بار توسط آب مقطر صورت گرفت. پس از این مرحله با اضافه کردن پتاسیم هیدروکسید یک مولار ماده به مدت ۳ روز در این محلول قرار گرفت. محصول این مرحله ابتدا توسط آب مقطر به خوبی شستشو داده شد و سپس در آون با دمای ۲۰۱۰ درجه سانتی گراد به مدت ۲ ساعت خشک گردید. برای عمل کربونیزاسیون ماده جامد در کوره با دمای درجه سانتی گراد به مدت ۲ ساعت حرارت دهی شد.

۲-۲ تولید نانوذرات مس اکسید

به محلول ۰/۱ مولار مس سولفات و سیتریک اسید به تدریج پتاسیم هیدروکسید یک مولار همراه به همزدن اضافه شد تا رسوب آبی رنگ تهیه شد. پس از شستشوی رسوب توسط آب مقطر و خشک کردن آن، به مدت ۳ ساعت رسوب حاصل در دمای ۵۰۰ درجه سانتیگراد در کوره حرارت داده شد.

دانسکاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

۲-۳ تهیه نانوگلهای مس اکسید

به محلول نیترات مس ۰/۵ مولار به تدریج همراه با همزدن آمونیاک اضافه شد تا رسوب به رنگ آبی تیره تهیه شد. محلول حاصل در حمام آب گرم و دمای ۹۰ درجه سانتی گراد به مدت ۲ ساعت قرار داده شد تا در نهایت رسوب سیاه رنگ بهدست آید. بعد از صاف کردن، شستشو و خشک کردن رسوب در آون با دمای ۱۲۰ درجه سانتی گراد نانوذرات مس اکسید بهدست می آید.

۳- بحث و نتیجه گیری

شکل ۱-الف، تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از مس اکسید سنتز شده از حرارت دادن توسط کوره تا دمای ۵۰۰ درجه سانتی گراد را نشان میدهد که بیشتر نانو ذرات مس اکسید سنتز شده یک توزیع همگن به شکل کروی هستند. شکل ۱-ب، تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی مس اکسید تهیه شده با حرارت دادن در حمام آب گرم تا دمای ۹۰ درجه سانتی گراد را نشان میدهد. نانوذرات مس اکسید به شکل نانوگلهای CuO قابل مشاهده هستند که با ساختار متخلخل، منظم و یکنواخت تشکیل شده است. علاوه بر این، نشان داده شده است که نانوگلها از چندین نانوساختار متخلخل متصل به یکدیگر تشکیل شدهاند که معماری سه بعدی را تشکیل میدهند.



شكل۱، تصویر میكروسكوپ الكترونی روبشی

شکل ۲، نمودار توزیع اندازه حفرات

شکل ۲، نمودار توزیع اندازه حفرات کربنفعال، مس اکسید و کربنفعال داپ شده با مس اکسید تهیهشده را نشان میدهد. نتایج نشان میدهد که میانگین قطر منافذ کربنفعال (AC)، مس اکسید تهیهشده در حمام آب گرم (A)، مس اکسید تهیهشده در کوره (B)، کربن داپ شده با مس اکسید تهیهشده در حمام آب گرم (A/AC) و کربن داپ شده با مس اکسید تهیهشده در کوره (B/AC) به ترتیب ۲/۶، ۲/۶، ۵۲/۲۱ و ۱۷/۹۵ و ۲/۷۶ نانومتر است. نانوساختارهای مس اکسید که در حمام آب گرم تهیه شده اند دارای سطح ویژه بزرگتری نسبت به نانوساختارهای مس اکسید تهیه شده در کوره هستند در حالی که اندازه حفرهها

منابع و مراجع

Goldstein, J., D.E. Newbury, and D.B. Williams, *X-ray spectrometry in electron beam instruments*, 2012.
 Yu, L., G. Zhang, Y. Wu, X. Bai, and D. Guo, Cupric oxide nanoflowers synthesized with a simple solution route and their field emission, Journal of Crystal Growth, 2008, 310, 3125-3130.

[3] Shinde, S.K., D.P. Dubal, G.S. Ghodake, and V.J. Fulari, Hierarchical 3D-flower-like CuO nanostructure on copper foil for supercapacitors, RSC Advances, 2015, 5, 4443-4447.

ار تباط بین نرخ پرش و حفظ همسازی در کانالهای یونی

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

مینا سیفی^{او*}، افشین شفیعی^۲

۱ و ۰۰ شیمی، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شریف، رایانامه (seifi.mina@ch.sharif.edu) ۲- دانشیار، شیمی، گروه شیمی فیزیک ، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شریف، رایانامه(shafiee@sharif.edu)

واژگان كليدى: سيستمهاى كوانتومى باز، زيستشناسى كوانتومى، كانالهاى يونى، همساززدايى كوانتومى، معادله شاخص ليندبلاد

۱– مقدمه

کانالهای یونی به دلیل مقیاس انرژی و فرآیندهای انتقال، بهعنوان سیستمهای پروتئینی ویژهای بررسی میشوند که احتمالاً اثرات کوانتومی در عملکرد آنها نقش دارد. این کانالها پروتئینهایی هستند که جریان یونهای خاص را در غشای سلول تنظیم میکنند و نقش مهمی در تعاملات سلولی ایفا میکنند. با توجه به ناکافی بودن مکانیک کلاسیک در توضیح گزینش پذیری کانالهای یونی، به نظر میرسد استفاده از مکانیک کوانتومی برای بررسی این مسئله ضروری است. اخیراً پیشنهاد شده است که فیلتر گزینش پذیری کانال یونی ممکن است همسازی کوانتومی نشان دهد، که ممکن است در توضیح انتخاب و هدایت یون در کانالهای یونی اهمیت داشته باشد[1]. در این مقاله، رابطه بین نرخ پرش و حفظ همسازی در کانالهای یونی بررسی میشود.

۲- روش

در این بخش، با استفاده از معادله شاخص لیندبلاد مدل را بیان کرده و تحول ماتریس چگالی کاهش یافته با استفاده از این معادله مورد بررسی قرار می گیرد. کراتوچویل و همکاران نشان دادند که مدل «کوبشی با مولکولهای آب» بیشترین تطابق را با تجربه دارد[2] . بنابراین، مدل مورد بررسی در حضور مولکولهای آب در نظر گرفته شد. برای این منظور، کانال یونی با چهار مکان مورد بررسی قرار گرفت. در این مدل یک سیستم سه حالته مطابق شکل ۱ در نظر بگیرید: ۱. یونهای پاسیم در مکانهای اول و سوم و مولکولهای آب در مکانهای دوم و چهارم قرار دارند. ۲. یونهای پتاسیم و مولکولهای آب در طول کانال از با یک پرش از یک مکان به مکان بعدی جابهجا میشوند. در اثر این جابهجایی یونهای پتاسیم در مکانهای دوم و چهارم و مولکولهای آب در مکانهای اول و سوم قرار خواهند گرفت. ۳. در نهایت یون پتاسیم از مکان قبلی به محیط آزاد میشود.



بنابراین این سیستم را میتوان در یک فضای هیلبرت سهبعدی مشابه یک سیستم اسپین-۱ نشان داد. لازم به ذکر است که در این مقاله \hbar برابر با یک در نظر گرفته شده است. تحول ماتریس چگالی با استفاده از معادله شاخص لیندبلاد به دست آمد: $\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = -i[\hat{H}(t),\hat{\rho}(t)] + L[\hat{\rho}(t)]$ (۱) هامیلتونی کل به صورت زیر در نظر گرفته می شود:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_1$$

(۲) که

 $\hat{H}_1 = c(|1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |1$

۳- بحث و نتیجه گیری

همسازی قابل چکانش با رعایت تمامی اصول معیارهای همسازی، بهعنوان یک معیار اساسی برای سنجش همسازی در سیستمهای کوانتومی شناخته میشود. در شکل ۲، همسازی قابل چکانش در برابر زمان برای مقادیر مختلف نرخهای پرش ترسیم شده است. در حالت نرخ پرش صفر، پس از زمان همساززدایی، همسازی به صفر میرسد (خط سیاه). با افزایش نرخ پرش، همسازی با وجود میل به صفر شدن، دچار نوسان میشود و افزایش نرخ پرش باعث نوسان همسازی قابل چکانش میشود. بنابراین سیستم حتی پس از زمان همساززدایی همساز باقی میماند.



شکل ۲ : همسازی قابل چکانش

شکل ۲ : همسازی قابل چکانش

سپس برای اثبات بیشتر این نتیجه، تابع همسازی کوانتومی مرتبه دوم (یا درجه همسازی) محاسبه شد. نتایج در شکل ۳ نشان داده شده است. با توجه به این شکل، با افزایش نرخ پرش، نه تنها نوسانات ظاهر میشوند، بلکه تابع همسازی مرتبه دوم نیز در نرخهای پرش بالا افزایش مییابد. در واقع، با افزایش نرخ پرش، سیستم توانایی بیشتری برای حفظ حالت همسازی خود نشان میدهد.

۴–نتیجهگیری

در این مقاله، رابطه بین نرخ پرش و حفظ همسازی در کانالهای یونی بررسی شد. نتایج از طریق معادله لیندبلاد در نرخهای مختلف پرش تحلیل شد. نوسان همسازی قابل چکانش و رفتار تابع همسازی مرتبه دوم نشان میدهد که سیستم در شرایط عبور سریع یونها همساز است. یافتهها نشان میدهند که گزینش پذیری و سرعت بالا در کانالهای یونی متناقض نیستند و سرعت بالا شرط ضروری برای گزینش پذیری است.

منابع و مراجع

[1] Vaziri, A., & Plenio, M. B. (2010). Quantum coherence in ion channels: Resonances, transport and verification. New Journal of Physics, 12(8), 085001..

[2] Kratochvil, H. T., Carr, J. K., Matulef, K., Annen, A. W., Li, H., Maj, M., Ostmeyer, J., Serrano, A. L., Raghuraman, H., & Moran, S. D. (2016). Instantaneous ion configurations in the K+ ion channel selectivity filter revealed by 2D IR spectroscopy. Science, *353*(6303), 1040–1044.

[3] Schlosshauer, D. (2007). The quantum-to-classical transition. In The Frontiers Collection (Springer-Verlag).



بررسی حذف آلایندههای محلول آبکاری کروم سخت با استفاده از روش الکترودیالیز

يدالله شاد'،*، نويد ريگى'، محمدرضا رخيان"، خليلالله دولتمند چهارسوقه ً

۱ و *- کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران رایانامه: shad.chemistry@gmail.com ۲- کارشناسی ارشد، مهندسی شیمی، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی navid.rigi@alumni.um.ac.ir - کارشناسی، شیمی کاربردی، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه پیام نور مشهد ۴- کارشناسی، مهندسی شیمی، گروه شیمی، جهاد دانشگاهی اصفهان

واژگان کلیدی: کروم سخت، آلایندههای فلزی، الکترودیالیز غشایی

۱–مقدمه

فرآیند آبکاری کروم یک عملیات نهایی است که معمولاً جهت بهبود خواص سطحی فلزات آهنی بکار میرود و در دو نوع آبکاری کروم تزئینی و به منظور زیبایی قطعات و آبکاری کروم سخت به منظور بهبود خواص سطحی از جمله سختی سطحی و مقاومت به خوردگی دسته بندی میشود. در صنعت آبکاری کروم سخت، حمامهای آبکاری توسط تجمع یونهای $^{+2}$ Cr³⁺ ،Cu²⁺ که با کاهش مقاومت به خوردگی دسته بندی میشود. در صنعت آبکاری کروم سخت، حمامهای آبکاری توسط تجمع یونهای $^{+2}$ Cr³⁺ ،Cu²⁺ که با کاهش مقاومت به خوردگی دوازم جانبی فلزی یا خود بستر فلز در محلول اسید کرومیک و همچنین یونهای $^{+2}$ Cr³⁺ که با کاهش $^{+2}$ Cr⁴⁺ میشود. آلوده می شوند. بنابراین حذف آنها به طور مداوم از حمام آبکاری جهت افزایش طول عمر حمام آبکاری حرفروی ضروری است تا از هزینه، مخاطرات زیست محیطی و مسئولیت قانونی مربوط به دفع مکرر این مواد و تصفیه پساب جلوگیری شود [۱]. در این پژوهش از بین روشهای مختلف حذف آلایندههای فلزی که عباتند از: الف- فیزیک و شیمیایی. امری ضروری شود [۱]. در این پژوهش از بین روشهای مختلف حذف آلایندههای فلزی که عباتند از: الف- فیزیک و شیمیایی. آندی $^{+7}$ Cr³⁺ که با کامی این خالوی خالول اسید کرومیک و محیایی به سبب داشتن ویژگی انجام اکسیداسیون جاوگیری شود [۱]. در این پژوهش از بین روشهای مختلف حذف آلایندههای فلزی که عباتند از: الف- فیزیک و شیمیایی. آندی $^{+7}$ Cr³⁺ که با کامی این این مواد [۱]. در این پژوهش از بین روشهای مختلف حذف آلایندههای فلزی که عباتند از: الف- فیزیک و شیمیایی بب رزین تبادل یونی. ج- الکترولیز. د- الکترودیالیز غشایی، روش الکترودیالیز غشایی به سبب داشتن ویژگی انجام اکسیداسیون آندی $^{+7}$ Cr³⁺ که خال در محلولهای اسید کرومیک است) و حذف ناخالصیهای کاتیونی از محلول آبکاری به طور رود این این ویژگی انجام اکسیداسیون جندی مرمان، مورد استفاده قرار گرفته است. این رومی کرومیک جهت این ویژگی انجام اکسیداسیون آندی $^{+7}$ Cr³⁺ که در این وی مولی این و راز گری و شیمایی است که در نوعی از آن کاتیونی ای مرمان مورد استان و گرفته و این این و راز که وی از آن کاتیونی از یکن و گران این و راز گری و خون ای کروی و که و راز گری و کرو و کر و کرون و کروی و کروی و کر و که و راز گری و خون و کر و کر و کراین و کرد و کر و کروی و از کردیوی و را و کر و خون و کرو و کر و کروی و ک

۲-روش

در این پژوهش از محلول مستعمل حمام کروم سخت پس از رقیق سازی جهت استفاده به عنوان آنولیت استفاده شد(جدول ۱) و برای اندازه گیری غلظتهای فلزات سنگین کروم شش ظرفیتی و کروم سه ظرفیتی روش تیتراسیون یدومتری و برای یونهای آهن و مس روش طیف سنجی نشر اتمی مورد استفاده قرار گرفت. برای محلول کاتولیت از اسید سیتریک خنثی شده با آمونیوم هیدروکسید و اضافه کردن تری اتانول آمین به عنوان عامل کمپلکس کننده به میزان ۳۵ گرم بر لیتر [۳] و از غشای پلیمری نفیون 117-NM ساخت شرکت الکتروکیمیا بسپار با سطح مقطع موثر ۶۴ سانتیمتر مربع استفاده شده است . طراحی آزمایش با استفاده از روش سطح پاسخ برای بهینه سازی سه متغیر غلظت محلول آنولیت، شدت جریان و غلظت محلول کاتولیت با ثابت نگه داشتن پارامترهای دیگر از قبیل دما (۳۰ درجه سانتیگراد)، دبی گردش محلول (۵ میلی لیتر بر دقیقه)، فاصله بین دو الکترود (۴ میلی متر)، الکترود از جنس سرب و زمان (۲ ساعت) انجام گرفت که مقادیر بهینه بعد از انجام آنالیزها در جدول ۲ درج شده است.

مهان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

جدول ١: غلظت اوليه آنوليت

غلظت (g/l)	عناصر آنوليت
۷۸.۶۰۲	Cr ⁶⁺
۸.۸۵۶	Cr ³⁺
۸.۲۱۸	Fe ³⁺
•.11Y	Cu ²⁺

جدول ۲: پارامترهای بهینه شده

واحد	مقدار	پارامترها		
گرم بر لیتر	178.811	Cr ⁶⁺		
گرم بر لیتر	۰.۱۳۸	Cr ³⁺ عبار براجع Fe ³⁺ عبار براجع		
گرم بر لیتر	۳.۸۱۹			
گرم بر لیتر	۰.۰۳۸	Cu ²⁺		
آمپر	۵.۲	ِيان	شدت جر	
نرمال	١.	غلظت كاتوليت		
ساعت	٢	زمان		
درجه سانتیگراد	٣٠	دما		
ml بر دقیقه	۵	دبی محلول		
میلی متر	۴	فاصله بين الكترودها		
	سرب	جنس الكترود		

جدول ۳: دامنه تغییرات پارامترهای فرآیندی و مقدار بهینه آنها

مقدار بهينه	مقادیر پارامترها	واحد	پارامترها
۶	8-4-7	ساعت	زمان
٧٠	۷۰-۵۰-۳۰	درجه سانتیگراد	دما
۵	10-10	ml بر دقیقه	دبی محلول
۴	17-8-6	میلی متر	فاصله الكترودها
سرب	سرب- تيتانيوم		جنس الكترود

در ادامه با استفاده از شرایط بهینه فوق سایر پارامترهای فرآیندی از قبیل زمان، دما، دبی، جنس الکترود و فاصله بین دو الکترود در سه سطح (جدول ۳)، جهت بهینه سازی آنها مورد بررسی قرار گرفت و مقادیر بهینه مطابق جدول ۳ بدست آورده شد و در پایان با شرایط بهینه حاصله اقدام به انجام الکترودیالیز محلول اسید کرومیک مستعمل بدون رقیق سازی گردید که تغییرات غلظت کاتیونهای فلزی در نمودار ۱ درج شده است.



نمودار ۱: تغییرات غلظتهای یون های ۲۰³⁺، Cr³⁺، Cr³⁺ و Cu²⁺ قبل و بعد از فر آیند الکترودیالیز



۳-بحث و نتیجه گیری

با بررسی اثر پارمتر زمان، دما، دبی، جنس الکترود و فاصله بین الکترود با هدف افزایش میزان کروم شش ظرفیتی و کاهش آلایندههای موجود در محلول کرومیک مستعمل میتوان گفت که افزایش زمان، دما و کاهش دبی و فاصله بین دو الکترود منجر به افزایش غلظت کروم شش ظرفیتی و کاهش آلایندهها در محلول می گردد. لذا با توجه به نتایج بدست آمده شرایط بهینه جهت افزایش عمر مفید محلولهای کروم سخت صنعت آبکاری برای فرآیند الکترودیالیز غشایی با استفاده از الکترودهای سربی با فاصله ۴ میلی متر، مدت زمان ۶ ساعت، دمای ۷۰ درجه سانتیگراد و دبی ۵ میلی لیتر بر دقیقه مهیا می گردد.

منابع

[1] Benaben, P., & Popakul, J. (2000). Purification & recycling process for hexavalent chromium solutions using a low-cost chemical method. Plating and surface finishing, 87(12), 88-91.

[2] Babu, B. R., Bhanu, S. U., & Meera, K. S. (2009). Waste minimization in electroplating industries: a review. J Environ Sci Health C Environ Carcinog Ecotoxicol Rev, 27(3), 155-77.

[3] Ehrsam, R. F. (1975) Purification of chromium plating solutions by electrodialysis, Google Patents.



مطالعه محاسباتی طیف رامان تقویت شده از سطح آمینوتولوئن در برهمکنش با سطح نقره و طلا

صهیب شاهمحمدنژاد ^۱، سحر اشتری ^۲، زهرا جمشیدی^{۳و»}

۱ - دانشجوی کارشناسی ارشد ، طیف سنجی محاسباتی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی شریف، soheibshmn@gmail.com

۲ - دکتری، طیف سنجی محاسباتی، شیمی فیزیک، پژوهشگاه شیمی و مهندسی شیمی ایران ، s.ashtari.j@gmail.com

njamshidi@sharif.edu ، دانشیار، طیف سنجی محاسباتی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی شریف، njamshidi

واژگان کلیدی: طیف سنجی رامان تقویت شده از سطح، آمینوتولوئن، نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان

۱– مقدمه

محاسبات کوانتومی در مطالعه برهم کنشهای شیمیایی، بهویژه بین مولکولهای آلی و فلزات، بهطور گسترده مورد استفاده قرار می گیرد. طیفسنجی رامان، که بر پراکندگی غیرالاستیک نور لیزر مبتنی است، ابزاری مهم برای بررسی ساختار و حالتهای ارتعاشی مولکولها است. در کنار پیچیدگیهای رامان، نظریه تابعی چگالی (DFT) یکی از روشهای محاسباتی پرکاربرد برای بررسی ساختار مولکولی و محاسبه خواص طیف سنجی است.[۱] همچنین به کمک نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان (TD-DFT) برای محاسبه طیفهای نوری و دینامیک الکترونی سیستمها، بهویژه در حالتهای برانگیخته، استفاده میشود. طیفسنجی رامان تقویتشده از سطح (SERS)، که با ایجاد میدان الکتریکی قوی در نانوساختارهای فلزی همراه است، باعث افزایش شدید سیگنال رامان میشود. نانوساختارهایی با رویکردهای متفاوت گزارش شده اند که میزان تقویت رامان به شدت به مورفولوژی نانوساختارها وابسته است. [۲] همچنین گاها تشدید انتقالات مولکولی زمانی بروز داده میشود که انرژی برانگیختگی مورفولوژی نانوساختارها وابسته است. [۲] همچنین گاها تشدید انتقالات مولکولی زمانی بروز داده میشود که انرژی برانگیختگی

۲- روش

باید دانست که شدت در طیف رامان با تقریباتی از قطبش پذیری کرامر-هایزنبرگ-دیراک با فرمول زیر به دست می آید. $\alpha_{\rho\lambda}^{i \to f} = \sum_{n} \mu_{0n,\rho} \mu_{0n,\lambda} \int_{0}^{\infty} \langle f | i_{n}(t) \rangle e^{-it(\Delta E_{0n} - \varepsilon_{i} - E_{L} - i\Gamma_{n})} dt$ (1)

در اینجا، μ0n,ρ و μ0n,λ به ترتیب مولفههای کارتزینی ρ و λ از گشتاور دو قطبی الکتریکی انتقالی از حالت پایه (۰) به حالت برانگیخته الکترونیn ام هستند. ΔEOn تفاوت انرژی الکترونی آدیاباتیک، EL انرژی لیزر، εi انرژی ارتعاشی، و Γn پهنای طیفی (همگن) حالت الکترونیn ام است. در ابتدا بعد از رسم ساختار مولکول های آمینوتولوئن، نقره(Ag6) و طلا(Au6) با استفاده از نرم افزار های بصری ساز شیمیایی، به سراغ بهینه سازی ساختار این مولکول ها با کمک روش نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان با تابع Bp86 و حد محاسباتی TightSCF و مجموعه پایه def2-TZVP در نرم فزار شبیه ساز ORCA می رویم و در این مرحله از محاسبه؛ فرکانس، انرژی پایه و طول پیوند های ساختار برای ما واضح می گردد.سپس با تکرار بهینه سازی با روش، توابع انتگرال گیری و مجموعه پایه های یکسان با مرحله قبل، برای ساختار های آلی-فلزی به دست آمده از برهمکنش میان مولکول فلزی طلا و نقره با آمینوتولوئن از سر پیوند سه گانه و گروه عاملی آمینی(در مجموع چهار ساختار) نتایج و اطلاعات مرحله قبل را برای کمپلکس های جدید به دست می آوریم.پس از این مرحله نوبت به انجام محاسبات نظریه تابع چگالی وابسته به زمان می رسد که در راستای آن دانسیته الکترونی ۵۰ سطح برانگیخته اول برای هر کدام از چهار ترکیب قبل، نسبت به حالت پایه رسم می شود و در نهایت نوع انتقالات نیز که می تواند به سه شکل مولکولی، درون خوشه ای و انتقال بار باشد، دسته بندی می شود.در نهایت با ترسیم اوربیتال های مولکولی درگیر در انتقال های حالت های برانگیخته مان و انتقال بار باشد، دسته بندی می شود.در نهایت با ترسیم اوربیتال های مولکولی درگیر در انتقال های حالت های برانگیخته منتخب که از دسته مولکولی و انتقال بار مهستند، دست به انتخاب طول موج نور لیزر ورودی جهت برانگیختگی ترکیب های مورد نظر زده و به محاسبه نهایی میزان شدت انرژی های حاصل از طیف رامان تقویت شده از سطح پرداخته می شود.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ تان ۱۴۰۳

۳- بحث و نتیجه گیری

نهایتا در پی دریافت نتایج حاصل از محاسبه های بهینه سازی ساختار و فرکانس، با دانستن طول پیوند جدید ایجاد شده میان مولکول و فلز و میزان اختلاف بار ایجاد شده بینشان در زمان برهمکنش نتیجه واقعی مشاهده شده در آزمایشگاه تایید میگردد؛ که این حالت بهینه برای فلز طلا با اختلاف بار بیشتر و طول پیوند کمتر از سر پیوند سه گانه ایجاد شده و برای فلز نقره از سر گروه عاملی آمینی می باشد و در قدم آخر نیز به محاسبه و مقایسه طیف های فرابنفش و رزونانس رامان ترکیب های ایجاد شده پرداخته شده است.





منابع و مراجع

[1] Kabiru Haruna , Tawfik A. Saleh.(2023) Dopamine functionalized graphene oxide (DGO) as a corrosion inhibitor against X60 carbon steel corrosion in a simulated acidizing environment; An electrochemical, weight loss, SERS, and computational study. Elsevier 2468-0230 https://doi.org/10.1016/j.surfin.2023.103688;
 [Y] P. L. Stiles, J. A. Dieringer, N. C. Shah, and R. P. Van Duyne,(2008) "Surface Enhanced Raman

spectroscopy," Annu.Rev. Analyt. Chem., vol. 1,pp. 601-626 [3] Zahra Jamshidi, Sahar Ashtari-Jafari, Aleksei Smirnov, and Elena V. Solovyeva.(2021). Role of Herzberg-Teller Vibronic Coupling in Surface-Enhanced Resonance Raman Spectra of 4,4'-Diaminotolane with Nearly Close Molecular and Charge-Transfer Transitions. © American Chemical Society. J. Phys. Chem. C 2021, 125, 17202-17211. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c04524;



بررسی جذب داروی فلودارابین بر نانو لوله ی کربنی تک جداره از طریق تئوری تابعی چگالی

نام و نام خانوادگی خدیجه شکوهی'**، سمیه عسکری'،

sh.shekoohi@gmail.com - شیمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد داراب sh.shekoohi@gmail.com ۲- مرکز تحقیقات مهندسی شیمی، نفت و پلیمر، ، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد شیراز

واژگان كليدى: نانوحامل، فلودارابين ،نانو لوله كربنى ، تئورى تابعى چگالى

۱– مقدمه

به دلیل نیاز روزافزون جامعه ی علمی به هدفمندی دارورسانی برای بیماریهای خاص که استفاده از داروهای آنها عوارض جانبی فراوانی برای فرد بیمار دارد، مطالعات بسیاری صورت گرفته که برای درک بهتر و بهینه کردن روند آزمایشگاهی جهت بررسی توانایی دارورسانی حاملهای دارو، به کارگیری روشهای تئوری و محاسباتی نقش مهمی را ایفا میکند (۱). نانوحاملها با تغییر خصوصیات فارماکوکینتیک دارو باعث بهبود عملکرد دارو وکاهش عوارض جانبی آن میشوند(۲). فلودارابین(Fludarabine) به عنوان داروهای ضد سرطان که جزء دسته آنتی متابولیت ها است و در سنتز ANA و RNA اشکال ایجاد میکند و همین امر سبب میشود که رشد سلولهای سرطانی کند گردد(۳) .در این تحقیق با استفاده از محاسبات روش تابعی چگالی جذب داروی ضد سرطان فلودارابین بر نانولوله کربنی تک دیواره (۵۵) بررسی شده است.

۲-روش

B3LYP ساختار های اولیه توسط برنامه Gauss view05رسم شدو محاسبات با استفاده از نرم افزار Guassian 09در سطح B3LYP و مجموعه پایه (b)Guassian 6 محاسبات در فاز گازی انجام شد. برای انجام محاسبات محدودیتی بر روی کل سیستم اعمال نشده است، بنابراین جذب و قرار گرفتن دارو کنار نانولوله کربنی بر اساس بهینه سازی انرژی کل سیستم می باشد. انرژی جذب دارو بر روی نانوحامل، و انرژی پایین ترین اربیتال مولکولی محاسبه شد.

۳- بحث و نتیجه گیری

ساختار نانو لوله کربنی (۵و۵)در نظر گرفته شد و ساختار نانو لوله و فلودارابین بهینه شده در شکل ۱ نمایش داده شده است. در ساختار بهینه شده ۲₂₀ طول پیوند *C – H ب*رابر^{آ]ه} 1.0834 Aمی باشد که با مقدار تجربی مطابقت دارد. قطر این نانو لوله کربنی ^{[]ه}94 می باشد که برای مدل سازی یک ساختار نانولوله اندازه مناسبی است.



شکل 2 ساختارهای بهینه شده داروی فلورادابین جذب شده بر سطح نانولوله کربنی در سطح *B3LYP/6-31g.

انرژی جذب بر طبق فرمول زیر حساب می شود :

(1)

 $E_{absorbtion} = E_{Drug/NT} - (E_{Drug} + E_{NT})$

در رابطه بالا E_{Drug/NT} انرژ ساختار بهینه شده دارو جذب شده بر روی نانولوله،E_{NT} انرژی ساختار بهینه شده نانولوله کربنی و E_{Drug/NT} نشان دهنده انرژی ساختار بهینه شده داروها به تنهایی می باشد. در جدول 1مقادیر انرژی های ساختارهای بهینه شده دارووکمپلکس نانولوله کربنی و دارو گزارش شده است. مقادیرمنفی انرژی جذب دارو ها بر سطح نانولوله ، نشان دهنده جذب داروها یک فرایند گرما زا است. من وجهار مین کنفران شمی فنریک ایران منبع این از این منبع ایران دانتگاه اصفهان ۲۹و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

كربنى.	نانولوله	بر روی	ها	، دارو	جذب	: انرژی	جدول ۱
--------	----------	--------	----	--------	-----	---------	--------

		E/a.u.	E _{ads} / KJmol ⁻¹	E _{HOMO} /ev	E _{LUMO} /ev	$\Delta E_{\rm H-L}/\rm ev$
FLU	Fludarabine	-1062/764		-6/182	-0/689	5/493
	Nanotube	-3059/929		-7/273	-6/308	1/712
FLU+NTs	Complex A	-4123/432	-1/939	-4/339	-2/582	1/757
	Complex B	-4123/429	-1/932	-4/490	-2/721	1/769
	Complex C	-4123/419	-1/905	-4/305	-2/549	1/757
	Complex D	-4123/425	-1/921	-4/418	-2/664	1/754

مقدار انرژی اربیتالهای HOMO و LUMO و شکاف انرژی ($\Delta E_{LUMO-HOMO}$) برای ترکیبات محاسبه شد. میزان شکاف انرژی بین دو سطح اربیتال HOMO و LUMO هنگامی که دارو جذب نانولوله شده است کاهش زیادی دارد که نشان دهنده ان است که دارو ها وقتی جذب سطح می شوند به یک گونه فعال تر برای عملکرد درمانی تبدیل می شوند و سریعتر به سلول هدف متصل می شوند.

منابع

[1] J. Zhao, X. Liu, Z. Zhu, N. Wang, W. Sun, C. Chen, Z. He, (2017) Molecular insight into the enhancement of benzene-carbon nanotube interactions by surface modification for drug delivery systems (DDS), Appl. Surf. Sci. 416 757–765

[^Y] M. Saeedi, M. Eslamifar, K. Khezri, S.M. Dizaj, **(2019)** Applications of nanotechnology in drug delivery to the central nervous system, Biomedicine &Pharmacotherapy. 111 666–675

[^r] Cheok, M.H., Yang, W., Pui, C.-H., Downing, J.R., (**2003**) Treatment-specific changes in gene expression discriminate in vivo drug response in human leukemia cells. Nat. Genet. 34, 85–90.



توسعه رابط کاربری پایتون با هدف استخراج هامیلتونین جفتشدگی ویبرونیک خطی

محمد شمس احمدسرائی '، زهرا جمشیدی ^{۲*}

mohammadshams@ut.ac.ir ا- کارشناس ارشد (پژوهشگر مهمان)، شیمی محاسباتی و طیفسنجی، دانشکده شیمی، دانشگاه شریف njamshidi@sharif.edu -۲- دانشیار، شیمی محاسباتی و طیفسنجی، دانشکده شیمی، دانشگاه شریف

واژگان كليدى: رابط كاربرى پايتون، مدل جفتشدگى ويبرونيك خطى (LVC)، ديناميك كوانتومى

۱- مقدمه

مدل خطی جفتشدگی ویبرونیک (Linear Vibronic Coupling - LVC) یک چارچوب نظری است که برای توصیف تعامل بین حالتهای الکترونی و ارتعاشی در سیستمهای مولکولی استفاده میشود. در این مدل، جفتشدگی ویبرونیک با استفاده از یک تقریب خطی مورد بررسی قرار می گیرد، به طوری که مختصات ارتعاشی بهصورت خطی با حالتهای الکترونی تعامل دارند. مدل LVC در مطالعه برهمکنشهایی که شامل حالتهای الکترونی نزدیک به هم هستند و جایی که نظریه اختلال ممکن است در توصیف دقیق جفتشدگی آنها ناکام بماند، برتری ویژهای دارد. در این روش، معمولاً مودهای ارتعاشی خمشی در نظر گرفته میشوند و جفتشدگی های مرتبه بالاتر برای سادهسازی توصیف هامیلتونین نادیده گرفته میشوند. این رویکرد در بهتصویر کشیدن ویژگیهای مهم برهمکنشهای ویبرونیک مؤثر بوده و میتواند فرآیندهای انتقال انرژی شامل چندین حالت الکترونی و پدیدههایی نظیر تعاملات نور و ماده در حفرههای نانوپلاسمونیک را توضیح دهد.^{۲۱} تمامی پارامترهای مدل LVC مقادیر ثابت یا خطی هستند که نشان میدهد میتوان آنها را با انجام یک محاسبه آغازین یا محاسبه تعادی مشتق اول بهدست آورد. تبدیل نتایج محاسبات آغازین به پارامترهای LVC به شکل سنتی برای سیستمهای بزرگ، اگر امکان ناپذیر نباشد، بسیار زمان گیر و پیچیده است. در این کار پژوهشی ما با توسعه رابط کاربری پایتون، تبیدل نتایج محاسبات آغازین به پارامترهای زمان گیر و پیچیده است. در این کار پژوهشی ما با توسعه رابط کاربری پایتون، تبیدل نتایج محاسبات آغازین به پارامترهای زمان گیر از خودکار کردهایم. با استفاده از این رابط کاربری، محقق میتواند به راحتی با استفاده از چند خط کد ساده پایتون، پارامترهای مدل LVC را برای سیستم خود محاسبه کند.

۲- روش

هامیلتونین الکترونی دیاباتیک ($\widehat{W}_{n,m}$) را میتوان به صورت یک بسط سری تیلور از پتانسیل دیاباتیک حول موقعیت هسته ای دلخواه، بر حسب مختصات بدون بعد نرمال(Q)، و مجموعه پایه ای از حالتهای الکترونی {n} بیان کرد: $\sum_{i=1}^{3N-6} \omega_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\right) \sum_{i=1}^{3N-6} \omega_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\right) \sum_{i=1}^{3N-6} \omega_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\right)$

$$\widehat{W}_{n,m} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\omega_i}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \widehat{Q}_i^2 \right) \mathbf{1} + E_n |n\rangle \langle n| + \sum_{i=1}^{\infty} \kappa_i^{(n)} Q_i |n\rangle \langle n| + \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{(n,m)} Q_i |n\rangle \langle m| \tag{1}$$
با بسط حول موقعیت تعادلی حالت پایه یا همان \mathbf{Q}_0 ، اولین جمله هامیلتونین مرتبه صفر مرجع در تقریب نوسانگر هماهنگ به دست میآید. در اینجا ω_i فرکانس i-ام حالت نوسانی Q_i و 1 نشاندهنده ماتریس واحد در فضای حالتهای الکترونی است. جمله دوم، تغییرات انرژی را بیان میکند که در آن E_n انرژی برانگیختگی عمودی از حالت پایه 0 = n تا حالت الکترونی برانگیخته n-ام است. در نهایت، $\kappa_i^{(n)}$ جفتشدگیهای درونحالتی و $\lambda_i^{(n,m)}$ ($n \neq m$) جفتشدگیهای بینحالتی غیرآدیاباتیک هستند.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

مختصات نرمال بدون بعد بهصورت جابهجایی از مختصات مرجع کارتزینی **r** به صورت زیر بیان میشوند:

$$Q_i = \sqrt{\frac{\omega_i}{\hbar}} \sum_{\alpha} T_{\alpha i} M_{\alpha}^{1/2} r \alpha \tag{(7)}$$

در اینجا، T_i بردار حالت نرمال i-أم در مختصات کارتزینی وزن دار شده جرمی و M ماتریس قطری جرمهای اتمی است. جفتشدگیهای مرتبه اول درونحالتی، تغییر مکان کمینهها در سطوح انرژی پتانسیل حالت برانگیخته را نسبت به حالت پایه در نقطه فرانک-کاندون توصیف میکنند. در حالی که جفتشدگیهای بینحالتی تعامل بین حالتهای الکترونی n-اُم و m-اُر را تحت جابهجاییهای مرتبه اول از حالت Q_i تعیین میکنند:

$$\kappa_i^{(n)} = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_i}} \sum_{\alpha} \frac{\partial E_n}{\partial r_\alpha} \frac{T_{\alpha i}}{\sqrt{M_\alpha}} = \frac{\partial E_n}{\partial Q_i} \Big|_{Q=Q_0} \tag{(7)}$$

$$\lambda_{i}^{(n,m)} = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_{i}} \sum_{\alpha} \frac{\langle \Psi_{n} | \hat{H} | \Psi_{m} \rangle}{\partial r_{\alpha}} \frac{T_{\alpha i}}{\sqrt{M_{\alpha}}}} = \frac{\partial \langle \Psi_{n} | \hat{H} | \Psi_{m} \rangle}{\partial Q_{i}} \Big|_{Q=Q_{0}} \tag{f}$$

رابط کاربری توسعهیافته در این پژوهش به گونهای طراحی شده است که در مرحله اول قابلیت اتصال به نرمافزارهای محاسبات ساختار الکترونی نظیر AMS، ORCA و Q-Chem را دارد تا محاسبات آغازین سیستم مورد مطالعه را انجام دهد. پس از اتمام این محاسبات، کد توسعهیافته به طور خودکار داده های لازم برای محاسبه پارامترهای مدل LVC را از خروجی این نرمافزارها استخراج می کند. سپس، با تلفیق و پردازش تمامی اطلاعات به دست آمده، رابط کاربری فایل اپراتور مورد نیاز برای اجرای محاسبات دینامیک کوانتومی با استفاده از نرمافزار MCTDH را ایجاد و آماده سازی می کند. این فرآیند به شکلی خودکار انجام می شود تا ضمن کاهش خطاهای دستی، کارایی و سرعت محاسبات بهبود یابد.

۳- بحث

کد توسعهیافته در این پژوهش قادر به استخراج پارامترهای LVC از نتایج محاسبات اولیه است. با این حال، انجام این محاسبات برای سیستمهای بزرگ، هم زمانبر و هم پرهزینه است؛ مسئلهای که لزوم بهینهسازی این فرآیند را برای سیستمهای بزرگ نمایان می سازد. استفاده از روشهای نیمهتجربی به جای روشهای آغازین، بسته به نوع سیستم تعریفشده، می تواند راهگشا باشد. هدف ما در آینده، به کارگیری روشهای آماری پیشرفته و تکنیکهای یادگیری ماشین برای پیشبینی سریعتر و دقیق پارامترهای LVC است. گسترش رابط کاربری این ابزار می تواند امکان استفاده از دادههای حاصل از این روشها را برای توسعه مدلهای یادگیری ماشینی فراهم کند و به کاهش هزینههای محاسباتی و افزایش کارایی در تحلیل سیستمهای بزرگ کمک نماید.



۴– نتیجه گیری

در این پژوهش، کد توسعهیافته قادر است پارامترهای هامیلتونین LVC را بهطور کارآمد و بدون وابستگی به اندازه سیستم، در زمان بسیار کوتاهی استخراج کند. رابط کاربری پیشرفته این کد امکاناتی برای تحلیل دقیق تر درجات آزادی با استفاده از روشهای آماری فراهم میکند. فراهم کردن امکان تمرکز بر جنبه شیمی-فیزیکی مسئله و صرفه جویی در زمان و انرژی، این ابزار را به رویکردی کاربردی برای بررسی سیستمهای بزرگ و پیچیده با استفاده از مدل LVC تبدیل کرده است.

منابع و مراجع

(1) Köuppel, H.; Domcke, W.; Cederbaum, L. S. Multimode Molecular Dynamics beyond the Born-Oppenheimer Approximation. In *Advances in Chemical Physics*; Advances in chemical physics; John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, NJ, USA, 2007; pp 59–246.

(2) Jamshidi, Z.; Kargar, K.; Mendive-Tapia, D.; Vendrell, O. Coupling Molecular Systems with Plasmonic Nanocavities: A Quantum Dynamics Approach. *J. Phys. Chem. Lett.* **2023**, *14* (50), 11367–11375.



مطالعه DFT جذب آمونيوم از محيط پساب توسط جاذب زئوليت كلينوپتيلوليت

مهناز شیخی' (*، حسین نورمحمدی'، علیرضا قلیپور "

۱ و ۰۰ دانشجوی دکتری ، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و لرستان، (sheikhi.m@fc.lu.ac.ir)) ۲- دکتری ، مهندسی معدن، پژوهشکده عناصر معدنی راهبردی و سازمان پژوهش های علمی و صنعتی ایران، (ghnpme@gmail.com) ۳- دکتری ، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و لرستان، (gholipour.a@lu.ac.ir)

واژگان كليدى: آمونيوم، زئوليت، كلينوپتيلوليت، جذب.

۱– مقدمه

وجود بیش از حد نیتروژن در محیط باعث ایجاد انحرافات جدی در چرخهی مواد مغذی طبیعی بین موجودات زنده، خاک، آب و جو شده است. نیتروژن به شکل آمونیوم میتواند در آبهای زیرزمینی و آب آشامیدنی قرار گیرد. روشهای مختلفی برای حذف نیتروژن آمونیاکی از آبها توسعه یافته است[۱]. زئولیتهای طبیعی به طور گستردهای برای حذف کاتیون هایی مانند آمونیوم در آب به کار میروند[۲]. زئولیت کلینوپتیلولیت پرمصرفترین جاذب برای تصفیهی آب است[۳].

۲- روش

مطالعات نشان دادهاند که DFT یکی از محبوبترین روش ها برای بررسی ساختار الکترونیکی جامدات است. ساختار آمونیوم از وب سایت PubChem بازیابی شده است. این مولکول در نرمافزار (MS) Biovia Materials Studio 2020 (MS) بارگذاری شد. ما ساختار هندسی آمونیوم را با استفاده از روش B3LYP با استفاده از یک مجموعه پایه عددی دوگانه (DND) از ماژول DM013 بهینهسازی کردیم. مدل جاذب زئولیت کلینوپتیلولیت از پایگاه داده IZA گرفته شد. با استفاده از ماژول DM013 ورش مورش AGA عملکردی چگالی (PBE) بهینه و سطح ۱۰۱ به عنوان لایه از کلینوپتیلولیت انتخاب شد. بهینهسازی هندسی برای زئولیت کلینوپتیلولیت در فضای کایرو با۱ × ۳ × ۳ spoint: در محیط حلال آب (COSMO) انجام شد شکل ۱. علاوه برای زئولیت کلینوپتیلولیت در فضای کایرو با۱ × ۳ × ۳ spoint: پس از بر این، جذب آمونیوم در چارچوب این سطح زئولیت با روش GGA و تابع چگالی BEB مورد مطالعه قرار گرفت. پس از بهینهسازی جذب آمونیوم در کلینوپتیلولیت، انرژی جذب کل با استفاده از معادله زیر محاسبه شد: (۱)

که در آن (Eabs) از اختلاف انرژی کل و مجموع انرژی آمونیوم(Eammonium) و انرژی زئولیت (Ezeo) به دست می آید.





شکل ۱: ساختار بهینه شده آمونیوم روی سطح زئولیت کلینوپتیلولیت

۳- بحث

مقدار Eab بر اساس دادههای به دست آمده از محاسبات و با جایگزینی آنها در معادله ۱، ۱۲۵٬۰۴۹کیلوژول بر مول به دست آمد. بررسی بارهای جزئی اتمهای اکسیژن، کلسیم و سدیم مربوطه قبل از برهم کنش سطحی زئولیت با آمونیوم نشان داد که مقدار بار مثبت و منفی این اتمها به علت برهمکنش آمونیوم و سطح تغییر پیدا کرده است جدول ۱. انرژی شکاف (Eg) برای تعیین خواص انتقال الکتریکی مولکولی است که خواص این کمپلکس طبق رابطه (۲) مورد بررسی قرار گرفت. (۲)

براساس رابطه (۲) ، انرژی گپ کمپلکس ۰.۰۰۴۵ الکترون ولت به دست آمد. بررسی نمودار دانسیته چگالی الکترونی در نزدیکی تراز فرمی، تغییرات اوربیتال p قبل و پس از برهمکنش با آمونیوم را به خوبی نشان میدهد. شکل ۲

پس از حذف آمونیوم از سطح	پس از برهمکنش با آمونیوم	عنوان
-٠.٣٩١	-•.491	اکسیژن شماره ۵
٠.٧٧١	۸۲۷.۰	کلسیم شماره ۳
۲۷۳. ۰	• .٣٣۴	سدیم شماره ۲

جدول ۱: مقایسه مقدار بارهای جزیی سطح زئولیت کلینو پتیلولیت در موقعیتهای متفاوت



شکل ۲: نمودار دانسیته چگالی الکترونی اوربیتال p سطح زئولیت کلینوپتیلولیت قبل و پس ازبرهمکنش با آمونیوم

۴– نتیجه گیری

در تحقیق حاضر میزان جذب آمونیوم توسط زئولیت کلینوپتیلولیت با استفاده از روش DFT اندازه گیری شد. بررسی بارهای جزئی اتمهای زئولیت نامبرده نشان داد که به دلیل انتقال بار که از آمونیوم به سطح زئولیت صورت گرفته نشان از برهمکنش یون آمونیوم با زئولیت کلینوپتیلولیت و متعاقبا جذب آن روی سطح زئولیت مذکور میباشد. همچنین محاسبه مقدار انرژی گپ، نمایانگر آن است که این زئولیت جاذب موثری برای جذب آمونیوم از محیط پسابها میباشد. تغییرات اوربیتالهای p در نمودار دانسیته چگالی الکترونی سطح این زئولیت صحت این نتیجه گیریها را تقویت مینماید.

منابع و مراجع

[1] Rožić, M., Cerjan-Stefanović, Š., Kurajica, S., Vančina, V., & Hodžić, E. (2000). Ammoniacal nitrogen removal from water by treatment with clays and zeolites. Water Research, 34(14), 3675-3681.
[2] Tao, Q., Hu, M., Ma, X., Xiang, M., Zhang, T. C., Li, C., ... & Liang, Y. (2015). Simultaneous removal of ammonium and nitrate by HDTMA-modified zeolite. Water Science and Technology, 72(11), 1931-1939. [3] Ming, D. W., & Boettinger, J. L. (2001). Zeolites in soil environments. Reviews in mineralogy and geochemistry, 45(1), 323-345.



یک مطالعهی شبیه سازی مولکولی برای تأثیر کلسترول بر تجمع فیبریلهای آمیلوئید بتا در غشاء سلولی

نفیسه صالحی نجف آبادی'*

۱ - شیمی فیزیک، دانشگاه اصفهان na_salehi84@yahoo.com

واژگان كليدى: بيمارى ألزايمر، پپتيد أميلوئيد بتا، تجمع أميلوئيدى، غشاء دولايەى ليپيدى، كلسترول.

۱– مقدمه

بیماری آلزایمر یکی از انواع شایع زوال مغز است که طبق نظریهی غالب، با تجمع پپتیدهای آمیلوئیدبتا بر روی غشاء سلولها معرفی میشود(۱و۲). کلسترول میتواند احتمال این تجمع را افزایش دهد.(۳و۴) در این مطالعه با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی تأثیر مولکولهای کلسترول موجود در یک غشاء سلولی را بر روی تجمع الیگومر آمیلوئید بتا بررسی میکنیم.

۲- روش

دو سامانهی طراحی شده شامل جعبههایی است که پیکربندی آنها بعد از ۲۰۰ نانوثانیه، در شکل ۱ نشان دادهشدهاست. در قسمت الف این شکل، تجمع الیگومر Aβ بر روی غشاء بدون کلسترول ارائه شدهاست. غشاء غنیشده با کلسترول همراه الیگومر Aβ در قسمت ب شکل نشان دادهشدهاست.



شکل۱– آرایش الیگومر Aβ در سطح بالایی غشاء، پس از ns ۲۰۰ شبیهسازی الف) یک غشاء بدون کلسترول همراه با پپتید، ، ب) غشاء غنیشده با کلسترول (مولکولهای کلسترول به رنگ سبز نشان دادهشدهاند) با پتید.

۳- نتايج وبحث

طبق شکل ۲ کاهش در مقادیر RMSF مشخص میکند حرکتهای موضعی الیگومر در حالت غشاء غنیشده از کلسترول تغییر زیادی داشتهاست و این موضوع نقش کلسترول را در کاهش این حرکات نشان میدهد.





توزیع پپتید اطراف غشاء تحت عنوان (g(H...P) ، بدین مفهوم است که هیدروژنهای قطبی الیگومرAβ اطراف اتم فسفر غشاء توزیع شدهاند و روند توزیع آنها در شعاع ۳ نانومتری اطراف فسفر طبق شکل ۳ است. وقتی کلسترول حضور دارد، افزایش توزیع پروتئین اطراف غشاء به وضوح مشاهده میشود.



شکل ۳: توابع توزیع شعاعی هیدروژنهای قطبی پروتئین و فسفر غشاء در دو حالت بدون کلسترول و همراه کلسترول.

⁴-نتيجهگيرى

تجمع و رسوب پپتید الیگومر Aβ بر روی غشاء دو لایهی لیپیدی و اثر کلسترول بر این تجمع، با طراحی دو مدل غشاء بدون کلسترول و در حضور کلسترول با استفاده از روش شبیهسازی MD مورد بررسی قرارگرفت. روشهای ارزیابی شبیهسازی دینامیک مولکولی در این مطالعه، محاسبه و رسم نمودارهای RMSF و RDF بود و نشان داد کلسترول بر کاهش رسوب مؤثر است.



منابع و مراجع

[1] C. Ballatore, V.M. Lee, J.Q. Trojanowski, (2007). Tau-mediated neurodegeneration in Alzheimer's disease and related disorders. Nat. Rev. Neurosci. 8, 663–672

[2] A. Burns, S. Iliffe, (2009) . Alzheimer's disease, BMJ 338, b158

[3] S. Banerjee, S. Mukherjee, (2018). Cholesterol: a key in the pathogenesis of Alzheimer's disease Chem. Med. Chem. 6(17), 1742–1743

[4] J. Habchi, S. Chia, C. Galvagnion, T.C.T. Michaels, M.M.J. Bellaiche, F.S. Ruggeri, M. Sanguanini, I. Idini, J.R. Kumita, E. Sparr, S. Linse, C.M. Dobson, T.P.J. Knowles, M. Vendruscolo, (2018). Cholesterol catalyses $A\beta 42$ aggregation through a heterogeneous nucleation pathway in the presence of lipid membranes Nat. Chem. 10(6), 673–683



اعمال میدانهای الکتریکی برای جلوگیری از تجمع پپتیدهای آمیلوئیدبتا بر روی غشاء سلولی: یک شبیهسازی دینامیک مولکول

نفیسه صالحی نجفآبادی'*، امیرلهراسبی'

na_salehi84@yahoo.com ا-شیمی فیزیک، دانشگاه اصفهان ۲- استاد ، فیزیک، دانشگاه اصفهان ۲- استاد ، فیزیک، دانشگاه

واژگان کلیدی: بیماری آلزایمر، میدان الکتریکی، تجمع آمیلوئید بتا، غشاء سلولی، شبیه سازی مدل سازی مولکولی

۱– مقدمه

بیماری آلزایمر با تجمع پپتیدهای آمیلوئیدی مختلف بر روی غشای سلول های عصبی همراه است. گرچه مطالعاتی در این زمینه انجام شدهاست(۱و۳) اما اثرات غیر حرارتی میدان های الکتریکی گیگاهرتز در این موضوع هنوز به خوبی شناخته نشده است(۲). از این رو، در این مطالعه، با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکول تأثیر میدانهای الکتریکی ۱ و ۵ گیگاهرتز بر تجمع پروتئینهای پپتید آمیلوئید بر روی غشای سلولی بررسی شده است. نتایج بهدستآمده نشان داد نفوذ پپتید به غشاء با افزایش فرکانس افزایش مییابد.

۲- روش

شبیه سازی با نرمافزار GROMACS v.2018.5 انجام شد. جهت اجرای شبیه سازی ها برای بررسی اثر شدت میدان الکتریکی و همچنین اثر فرکانس، در میزان تجمع آمیلوئید بتا سامانه ای طراحی شد شامل غشاء دو لایه لیپیدی با نام POPC شامل ۱۲۷ لیپید، مورد استفاده قرار می گیرد. این غشاء از کلسترول غنی شده است. حلال و یون نیز به این مجموعه اضافه می شود. در نهایت پپتید الیگومر آمیلوئید بتا در یک طرف غشاء، قرار می گیرد. به این ترتیب یک سلول واحد جهت انجام مطالعات تشکیل می شود. مجموعاً سه شبیه سازی طراحی شد که شکل های نهایی این شبیه سازی ها پس از زمان ۱۰۰ نانوثانیه در معرض میدان الکتریکی در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل۱: تجمع الیگومر Aβ روی غشاء پس از ۱۰۰ B شبیه سازی برای الف: ۰.۰۲ ولت بر نانومتر، ۱ گیگاهر تز ب: ۰.۰۷ ولت بر نانومتر، ۱ گیگاهرتز ج: ۰.۰۲ ولت بر نانومتر، ۵ گیگاهرتز



۳- نتایج و بحث

سه مجموعه طراحی شده به همراه حالت بدون اعمال میدان در جدول ۱ فهرست شدهاست.

E0 (mv/nm)	υ(GHz)	حالت
•	•	Case-I
۲.	١	Case-II
٧٠	١	Case-III
۲۰	۵	Case-IV

جدول ۱: پارامترها و حالتهای میدان الکتریکی اعمال شده در موارد مختلف

مولکولهای لیپید غشاء دارای دو شاخه هستند که با نامهای پالمیتویل و اولئویل شناخته می شوند. پارامتر نظم برای این دو شاخه با فرمول $\left< \frac{1}{2} - (\cos^2 \theta) - \frac{1}{2} \right>$ محاسبه می شود. در این عبارت، زاویهای که مشخص کننده میزان انحراف دم لیپید است (θ) در طول شبیه سازی اندازه گیری می شود. برای سهولت کار در نمودارهای پارامتر نظم شکل ۲، شاخهها را با نامهای SN1 و SN2 معرفی کرده ایم.



شکل۲ : پارامتر نظم غشاء (SCD) دو زنجیره هیدروکربنی لیپیدی با نامهای اختصاری SN₁ و SN₂ در حضور و عدم حضور میدانهای الکتریکی.

همانطور که مشاهده میشود افزایش در قدرت میدان الکتریکی تا ۷۰ میلی ولت بر نانومتر، مولکولهای لیپید را از حالت نرمال خارج کردهاست و افزایش در فرکانس تا ۵GHz باعث شدهاست مولکولهای غشاء در شاخه پالمیتویل منظمتر شوند.

۴–نتیجهگیری

با توجه به نتایج ذکر شده میتوان گفت میدان الکتریکی با شدت بالاتر میتواند در جلوگیری و بهبود بیماری آلزایمر مؤثر باشد اما افزایش فرکانس نتیجه عکس داشته و احتمالاً باعث شدت بیماری میشود. حالت بهینه در بین میدانهای اعمال شده یک گیگاهرتز و میدان ۷۷/۰۳/۰در زمان صد نانوثانیه میباشد. شکلهای حاصل از شبیهسازی دینامیک مولکولی خواص ساختاری مدل پیشبینی شده را تأیید میکند.

14.1

منابع و مراجع

[1] A. Kumar, A. Singh, Ekavali, (2015) A review on Alzheimer's disease pathophysiology and its management: an update. Pharmacol. Rep. 67, 195–203.

[2] N.J. English, C.J. Waldron, (2015) Perspectives on external electric fields in molecular simulation: Progress, prospects and challenges, Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 12407–12440.

[3] N. Salehi, A. Lohrasebi, M. Rezaeisaadaat, A.K. Bordbar, (2022) The influences of cholesterol and AC0107 inhibitor molecules on the Amyloid-beta fibrils aggregation in cell membranes: Molecular modeling approach, Eur. Phys. J. Plus. 137, 460



شکل۲: آرایش الیگومر Aβ در سطح بالایی غشاء، پس از ۲۰۰ ns شبیهسازی: الف: غشاء غنیشده با کلسترول (مولکولهای کلسترول به رنگ سبز نشان دادهشدهاند) با پتید، با علامت اختصاری E-C-M، ب: غشاء غنیشده با کلسترول همراه مولکولهای داروی [AC0107](رنگ زرد) همراه با پپتید، با علامت اختصاری E-C-M/drug.



۴-نتیجهگیری

در بررسی اثر داروی مورد نظر، کاهش حضور الیگومرها در غشاء با کمک آنالیزهای MSD و پروفایل چگالی جرم کاملا مشهود است و این موضوع ویژگی محافظتی مولکول های [AC0107] را در برابر تجمع الیگومر Aβ روی غشاء. اثبات میکند.



منابع و مراجع

Liu, Z, & Zhang, A., & Sun, H. & Han, Y., & Konga, L., & Wang, X. (2017) Two decades of new drug discovery and development for Alzheimer's disease, RSC Advances. 7, 6046–6058
 Salehi, N., & Lohrasebi, A., & Rezaeisaadaat, AM., & Bordbar, A.K. (2022) The influences of cholesterol and AC0107 inhibitor molecules on the Amyloid-beta fibrils aggregation in cell membranes: Molecular modeling approach, Eur. Phys. J. Plus. 137, 460



دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

مینا صدیقی^۴، زکیه اسمعیلی^۲، علیرضا سلیمانی نظر^۳، مهرداد فرهادیان^۴ ۱ =- پسادکتری،گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان، mina.sedighi1986@eng.ui.ac.ir ۲ - پسادکتری،گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان، asolaimany@eng.ui.ac.ir ۳- دانشیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان، m.farhadian@eng.ui.ac.ir

واژگان كليدى: فرآيند اكسيداسيون پيشرفته (AOP)، نظريه تابع چگالى (DFT)، فوتوكاتاليست، خواص الكترونيكي، خواص نورى

۱–مقدمه

با صنعتی شدن جوامع و ازدیاد آلودگیهای صنعتی تامین آب پاک و سالم برای مصارف انسانی به یک موضوع چالش برانگیز تبدیل شده است. فرآیندهای اکسیداسیون پیشرفته (AOPs) با استفاده از نانوساختارهای نیمه هادی به دلیل اکسیداسیون فوتوکاتالیستی که تحت نور مرئی یا اشعه ماوراء بنفش فعال میشود، پتانسیل زیادی برای تخریب آلاینده های آلی دارند (Wu واکنش می دهند تا گونههای فعال از جمله رادیکالهای هیدروکسیل و آنیونهای رادیکال سوپراکسید تولید کنند و منجر به واکنش می دهند تا گونههای فعال از جمله رادیکالهای هیدروکسیل و آنیونهای رادیکال سوپراکسید تولید کنند و منجر به تخریب کامل یا جزئی آلایندههای پایدار شوند (2022) (Alves et al., 2023). با وجود پیشرفتهای سریعی که در معرفی، سنتز و مشخصهیابی مواد فوتوکاتالیستی نیمه هادی صورت گرفته است، یکی از چالشهای موجود در این زمینه رسیدن به درکی عمیق از خواص ذاتی نیمه هادیها، مکانهای فعال سطحی، و سازوکارهای واکنش فوتوکاتالیستی است. اخیراً با پیشرفت به درکی عمیق کامپیوتری، روشهای شبیه سازی مواد از جمله محاسبات کوانتومی نظریه تابعی چگالی (DFT)، بر اساس معادله شرودینگر، به ابزار مهمی برای محققان تبدیل شدهاند. هدف این مطالعه، معرفی و بررسی برخی کاربردهای محاسبات DFT در تعیین خواص فوتوکاتالیستها در تحلیل عملکرد فوتوکاتالیستی می باشد.

۲- تحليل نظرى خواص فوتوكاتاليستها

با استفاده از انجام محاسبات DFT در فوتو کاتالیستها میتوان پدیدههای زیر را پیشبینی کرد: ۱- ساختار الکترونیکی مواد فوتو کاتالیستی، مانند ساختارهای نواری، شکافهای نواری، و سطوح انرژی، ۲- واکنشهای سطحی مواد فوتو کاتالیستی با پیشبینی انرژیهای جذب، مسیرهای واکنش، و موانع فعالسازی واکنشهای سطحی، ۳- فرآیندهای انتقال بار در سطح اتمی از جمله حرکت الکترون ها و حفره ها، جزئیات مکانیکی واکنشهای فوتو کاتالیستی، از جمله گونههای میانی، حالتهای گذار، و مسیرهای واکنش (Zhang, 2024 & D). شکاف نوار الکترونیکی یک نیمه هادی که در محدوده ۷۵ ۲/۰ تا ۰/۳ قرار می گیرد، کارایی آن را در بهرهبرداری از نور طبیعی در کاربردهای فوتو کاتالیستی تعیین می کند. توانایی اکسیداسیون و احیاء یک ماده نیمه هادی را میتوان از طریق محاسبه موقعیتهای نوار ظرفیت (VB) و نوار رسانایی (CB) مشخص کرد. علاوه بر پیشبینی شکافهای نواری، محاسبات DFT همچنین نقش مهمی در تعیین موقعیت لبههای نوار در یک ماده برای درک ساختار الکترونیکی، خواص انتقال بار، رفتار نوری و واکنش پذیری شیمیایی ایفا می کنند. به عنوان مثال، موقعیت لبههای نواری بر خواص انتقال حاملهای بار یک ماده تأثیر می گذارد (Lin et al., 2024)، در مبحث واکنش پذیری شیمیایی، موقعیت بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) می تواند بر توانایی ماده برای اهدای الکترون در واکنشهای شیمیایی تأثیر بگذارد، در حالی که موقعیت پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (LUMO) می تواند ویژگیهای پذیرش الکترون آن را تعیین کند (Du & Zhang, 2024). چگالی حالت (DOS) که به عنوان تعداد حالتهای الکترونیکی در واحد حجم، در واحد انرژی در ه سطح انرژی که برای اشغال در دسترس هستند، تعریف می شود اساساً با ساختار نواری مطابقت دارد. اگرچه، با محاسبه نمودارهای DOS جزئی می توان سهم هر اتم رابه طور جداگانه در تعیین حالتهای الکترونیکی مواد نیمه هادی نشان داد.

کا داصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

فوتوکاتالیستهای با راندمان بالا به ضریب جذب نور بالا (^۱-۲۰^۵ cm) برای تولید جفتهای الکترون-حفره تحریکشده نیاز دارند (Meng et al., 2019). عملکرد جذب نور فوتوکاتالیستهای نیمه هادی مربوط به ساختار الکترونیکی آنها است. با توجه به ساختار نوار الکترونیکی شبیهسازی شده، ویژگیهای نوری یک فوتوکاتالیست نیمههادی را میتوان با محاسبه تابع دی الکتریک زیر نحلیل کرد (Aktary et al., 2022):

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 i$$

با محاسبه بخش حقیقی (*1*³) و بخش موهومی (*2*³) تابع دی الکتریک میتوان خواص نوری فوتوکاتالیستها از جمله ضریب جذب، هدایت نوری، بازتاب و ضریب شکست را محاسبه کرد (Aktary et al., 2022). محاسبات DFT همچنین میتواند سازوکارهای واکنش را در فرآیندهای فوتوکاتالیستی و مکانهای فعال واکنشی را پیش بینی کند (Du & Zhang, 2024). برای واکنشهای فوتوکاتالیستی که شامل انتقال الکترون هستند، هر مرحله از انتقال الکترون یک واکنش عنصری در نظر گرفته میشود که تغییر انرژی آن را میتوان توسط انرژی آزاد گیبس محاسبه کرد (2024). در طول فرآیند واکنش، میشود که تغییر انرژی آن را میتوان توسط انرژی آزاد گیبس محاسبه کرد (2024) و سینتیکهای واکنش دارند. تمرکز محاسبات DT در نظر گرفتن حالت گذار نیز مهم است، زیرا نقش مهمی در درک سازوکارها و سینتیکهای واکنش دارند. تمرکز محاسبات DT اغلب بر روی تعیین انرژی نسبی واسطهها و محصولات برای ارزیابی امکان سنجی و ترمودینامیک واکنش است (& DL Chang, 2024). از دیگر خواص فوتوکاتالیستها که میتوان با استفاده از محاسبات DT خواص انتقال بار، انرژی سطحی و خواص جذبی فوتوکاتالیست با استفاده از محاسبه انرژیهای پیش بینی کرد تابع کار، تابع فوکوئی، کریستالی (COOP) میباشد.

۳- نتیجهگیری

(1)

همانطور که ذکر شد، محاسبات کوانتومی DFT میتواند به طور گسترده برای پیشبینی خواص ساختاری، الکترونی و نوری فوتوکاتالیستهای نیمههادیها استفاده شود. همچنین با استفاده از این روش میتوان مسیر واکنش تخریب آلایندههای آلی را پیشبینی کرد. از این رو، روش DFT به ابزاری ضروری در پیشبرد درک ما از خواص و سازوکارهای فوتوکاتالیستی تبدیل شده است. این روش همچنین میتواند برای غربالگری و طراحی فوتوکاتالیستهای جدید استفاده شود.

منابع و مراجع

[1] Wu, H., Li, L., Wang, S., Zhu, N., Li, Z., Zhao, L., & Wang, Y. (2023). Recent advances of semiconductor photocatalysis for water pollutant treatment: mechanisms, materials and applications. Physical Chemistry Chemical Physics, 25(38), 25899-25924.

[2] Alves, D. C. d. S., de Farias, B. S., Breslin, C., Pinto, L. A. d. A., & Cadaval, T. R. S. A. (2022). Chapter 18 -Carbon nanotube-based materials for environmental remediation processes. In D. Giannakoudakis, L. Meili, & I. Anastopoulos (Eds.), Advanced Materials for Sustainable Environmental Remediation, 475-513.

[3] Du, S., & Zhang, F. (2024). General applications of density functional theory in photocatalysis. Chinese Journal of Catalysis, 61, 1-36.



[4] Meng, X., Yun, N., & Zhang, Z. (2019). Recent advances in computational photocatalysis: A review. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 97(7), 1982-1998.

[5] Aktary, M., Kamruzzaman, M., & Afrose, R. (2022). A comparative study of the mechanical stability, electronic, optical and photocatalytic properties of CsPbX₃ (X = Cl, Br, I) by DFT calculations for optoelectronic applications. RSC Advances, 12(36), 23704-23717.

[6] Lin, C.-H., Rohilla, J., Kuo, H.-H., Chen, C.-Y., Mark Chang, T.-F., Sone, M., Ingole, P. P., Lo, Y.-C., & Hsu, Y.-J. (2024). Density-Functional Theory Studies on Photocatalysis and Photoelectrocatalysis: Challenges and Opportunities. Solar RRL, 8(10), 2300948.



دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

کبری صلابت' و حسن سبزیان ٔ

^۱ دانشجوی دکتری شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان. (k.salabat@gmail.co). ^۲ استاد شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان. (sabzyan@sci.ui.ac.ir)

واژگان کلیدی: دوپایایی، کمپلکس دوهستهای، انتقال بار درونمولکولی، کلیدزنی مولکولی زیرقرمز، محاسباتی

۱– مقدمه

۲ - روش

کمپلکس دوهستهای کبالت-آهن سیس-سیس ^{۱+}[$_2(secn))Fe(bpym)(co(-bpym))Fe(bpym)[2]$ برای بررسی پیده دوپایایی ناشی از انتقال بار درونمولکولی طراحی و درنظر گرفتهشد. این طراحی بر اساس گزارش سنتز و مشخصهیابی کمپلکس آهن-آهن با همین ساختار بود [۲]. ساختارهای اولیه کمپلکس دوهستهای موردنظر در دو حالت اکسایشی -^{II}D] کمپلکس آهن-آهن با همین ساختار بود [۲]. ساختارهای اولیه کمپلکس دوهستهای موردنظر در دو حالت اکسایشی -ICo^{II} (Co^{III}-Fe^{II}] با چندگانگیهای اسپینی مختلف، از کنارهمآوردن ساختارهای بهینهشده کمپلکسهای تکهستهای کبالت [Co^{III}-Fe^{II}] با چندگانگیهای اسپینی مختلف، از کنارهمآوردن ساختارهای بهینهشده کمپلکسهای تکهستهای کبالت و آهن سازنده آن در حالات مختلف اکسایشی -ICo^{III} (Co^{III}-Fe^{II}] به خدگانگیهای اسپینی مختلف، از کنارهمآوردن ساختارهای بهینهشده کمپلکسهای تکهستهای کبالت و آهن سازنده آن در حالات مختلف اکسایشی-ICo^{III} (Co^{III}-Fe^{II}] و [Co^{III}-Fe^{II}] به نمان می در حالات مختلف اکسایشی-ICo^{III} (Co^{III}-Fe^{II}) به نمان می دو مختلف اکسایشی-ICo^{III} (Co^{III}-Fe^{II}) به نمان در حالات مختلف اکسایشی-ICo^{III} (Co^{III}-Fe^{II}) و [Co^{III}-Fe^{II}] ، حالت اسپینی 4 = S پایدار ترین است. شدند. نتایج نشان می دهد که برای هر دو کمپلکس [IIICOII] و [Co^{III}-Fe^{III}] ، حالت اسپینی 4 = S پایدار ترین است. ویژگی دوپایایی ناشی از پدیده انتقال بار درونمولکولی (IMCI) بین دو بخش کمپلکس که منجر به تبدیل دو حالت اکسایشی ویژگی دوپایایی ناشی از پدیده انتقال بار درونمولکولی (IMCI) بین دو بخش کمپلکس که منجر به تبدیل دو حالت اکسایشی ویژگی دوپایایی ناشی از پدیده انتقال بار درونمولکولی (IMCI) بین دو بخش کمپلکس که منجر به تبدیل دو حالت اکسایشی ویژگی دوپایایی ناشی از پدیده انتقال بار درونمولکولی (IMCI) بین دو بخش کمپلکس که منجر از توزیع بارهای الکتریکی و ویژگی دوپایی ناشی از گرفت. توزیع بارهای الکتریکی و چگالیهای اسپین اتمی و گروهی، بسامدهای ارتهای ساختار حالت گذار بین دو حالت اکسایشی [ICo^{III}-Fe^{II}] و (Co^{III}-Fe^{III}) و و مشرد دو حالت اکسایشی دو باز کرفت. توزیع بارهای الکتریکی و چمپلکس دوستهای در (IRC)، محاسبه و مورد مطالعه قرار گرفت.

۳- نتايج و بحث

تجزیه و تحلیل ساختاری نشان می دهد در نتیجه پدیده انتقال بار درونمولکولی (IMCT) از بخش کبالت به بخش آهن در تبدیل حالت اکسایش کمپلکس دوهستهای از [Co^{II}-Fe^{II}] به [Co^{III}-Fe^{II}] ، طول پیوندهای کئوردیناسیونی، زوایای پیوندی کره کئوردیناسیون و زوایای دووجهی تغییر میکند و به وضوح متمایزبودن ساختار این دو حالت اکسایشی و دوپایایی این کمپلکس دوهستهای را نشان میدهد. بررسی کلی بارهای الکتریکی NBO محاسبهشده نشان میدهد که فرآیند انتقال بار $[Co^{II}-Fe^{III}]$ در $[Q_{[Co]}=0.458, Q_{[Fe]}=0.542)$ در این کمپلکس با بازتوزیع چگالی بار دو بخش کمپلکس از ($Q_{[Fe]}=0.458, Q_{[Fe]}=0.542$) در $[Co^{II}-Fe^{III}]$ به ($Q_{[Fe]} = 0.859$, $Q_{[Fe]} = 0.141$) به ($Q_{[Co]} = 0.859$, $Q_{[Fe]} = 0.141$) به ($Q_{[Fe]} = 0.141$) ($Q_{[Fe]} = 0.141$) به ($Q_{[Fe]} = 0.141$) ($Q_{[Fe]} = 0.141$) ($Q_{[Fe]} = 0.141$) كئورديناسيون يون كبالت (بخش كبالت [Co]) به فضاى كئورديناسيون يون آهن (بخش آهن [Fe]) جابجا مي شود. غير صحيح (غیرکامل) بودن این میزان جابجایی بار الکتریکی (۰/۴۰۲ e)، گویای ماهیت بسیط چگالی الکترونی است و نقش اتصال دو ساختار کئوردیناسیونی به یکدیگر در بازتوزیع چگالی الکترونی نسبت به کمپلکسهای تکهستهای را نمایان می کند. بزرگترین تغییرات در بارهای تمام اجزای هر دو بخش کمپلکس، متعلق به لیگاندهای سلنوسیانات (−SeCN) است و بیشتر بر روی اتمهای سلنيوم آنهاست. مي توان گفت كه واكنش IMCT در اين كمپلكس دوهستهاي عمدتاً شامل يك انتقال الكترون درون مولكولي لیگاند به لیگاند (L-L) بین دو مجموعه از جفت لیگاندهای [−]SeCN در بخشهای کئوردیناسیونی [Co] و [Fe] است. بردار گشتاور دوقطبی الکتریکی در دو حالت اکسایش [Co^{II}-Fe^{II}] و [Co^{III}-Fe^{II}] و در ساختار گذار TS بین آنها با مقداری انحراف تقريباً در امتداد محور اتصال دو مركز فلزي است كه بعد از واكنش IMCT ، جهت آن تقريباً معكوس مي شود و بزرگي و انحراف آن از محور واصل دو یون فلزی در حالت [Co^{III}-Fe^{III}] نسبت به حالت [Co^{II}-Fe^{III}] بیشتر شده است. بر اساس این مشاهدات می توان گفت توزیع بار الکتریکی بر روی لیگاندها در حالت اکسایش [Co^{III}—Fe^{II}] نسبت به حالت اکسایش [Co^{II}-Fe^{III}] نامتقارنتر میباشد. توزیع چگالی الکترونی و اسپینی نشان میدهد روندهای تغییرات بارهای الکتریکی و تغییرات مقادیر اسپین اتمی و گروهی در واکنش انتقال بار درونمولکولی با یکدیگر مطابقت دارند. توزیع چگالی اسپین نشان میدهد که بخش عمدهای از اسپین الکترونهای جفتنشده یون فلزی بر روی لیگاندهای سلنوسیانات همان بخش کئوردیناسیونی توزیع شده است و برای بخش کبالت بزرگتر از بخش آهن در هر سه حالت [Co^{II}-Fe^{II}]، [Co^{III}-Fe^{II}] و TS است. برای ساختار حالت گذار (TS) در واکنش انتقال الکترون درونمولکولی یک نقطه زینی مرتبه اول (حالت گذار) با یک شیوه منفی با بسامد مجازی i cm⁻¹ بهدست آمد. با شروع از ساختار TS پیداشده، مسیر ذاتی واکنش (IRC) [۳] که متناظر با مسیر کمینه انرژی تبدیل واکنشدهنده بهینهشده [Co^{II} -Fe^{II}] انرژی تبدیل واکنشدهنده [$P_{opt}^{c} = [Co^{II}$ -Fe^{II}] انرژی تبدیل واکنشدهنده ا TS است، در دو بخش یکی با مسیر معکوس از TS به سمت واکنش دهنده [Co^{II}-Fe^{III}] و دیگری با مسیر رفت از TS به سمت محصول [Co^{III}-Fe^{II}] بهدست آمد. نمودار IRC بهدست آمده در این محاسبات در شکل (۱) نشان داده شده است. با در نظر گرفتن انرژیهای فعالسازی کوچک مربوط به دو واکنش رفت و برگشت واکنش انتقال الکترون درونمولکولی IMCT (forward)= ۱۳/۱ kJ/mol) و اختلاف انرژی اندک (۱۴/۸ کیلوژول بر مول) بین واکنش (۱۴/۸ میلوژول بر مول) بین واکنش دهنده [Co^{II}-Fe^{III}] و محصول [Co^{II}-Fe^{III}]، میتوان نتیجه گرفت که واکنش انتقال بار درون مولکولی که این دو حالت اکسایش را از طریق حالت گذار مشخص شده به یکدیگر تبدیل می کند، توسط تابش زیرقرمز میانی (MIR) قابل تحریک است. در ادامه، با مطالعه میزان اختلاف بارهای الکتریکی گروههای اتمی و اختلاف طولهای پیوندهای کئوردیناسیونی بین زوج ساختارهای (R و TS)، (P و TS) و (R و P) مربوط به تبدیل $R \rightarrow TS \rightarrow P$ مشخص شد که حالت گذار واکنش بیشتر به حالت نهایی [Co^{III}-Fe^{III}] شبیه است و بنابراین یک حالت گذار دیررس است.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳



بررسی ترمودینامیکی تجمع مایع یونی ۱-هگزیل ۳-متیل ایمیدازولیوم برمید درمخلوط های حلالی آب و ۲-اتوکسی اتانول براساس اندازه گیری هدایت سنجی

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳

جواد صمدی شال^۱، بهرام قلمی چوبر^{۲٬۰}، مونا اشتری دلیوند^۳

ا -دانشجوی دکتری،رشته شیمی فیزیک،گروه شیمی ، پردیس دانشگاهی دانشگاه گیلان javadsamadi89@yahoo.com ۲و*-نویسنده مسئول:استاد شیمی فیزیک،گروه شیمی کاربردی،دانشکده شیمی دانشگاه گیلان b-ghalami@guilan.ac.ir ۳-دانش آموخته دکتری شیمی فیزیک،گروه شیمی کاربردی،دانشکده شیمی دانشگاه گیلان monaashtaridelivand@yahoo.com

واژگان كليدى: تجمع يونى، ١-هگزيل ٣-متيل ايميدازوليوم برميد، ٢- اتوكسى اتانول، هدايت سنجى

۱–مقدمه:

مایعات یونی دسته جدید و نو ظهوری از ترکیبات هستند که دارای کاتیون های حجیم آلی و آنیون های معدنی یا آلی می باشند و به دلیل تطبیق پذیری آنها در واکنش ها بسیار مورد توجه دانشمندان هستند . این ترکیباتبه دلیل خواص فیزیکو شیمیایی منحصر به فرد خودکه شامل غیر قابل اشتعال، غیر فرار، بازیافت خوب، انحلال پذیری و پایداری زیاد ، جامعه تحقیقاتی را متحول کرده اند و در کاربرد های متنوعی مانند استفاده از آنها در شیمی، بیوشیمی، به عنوان الکترولیت در سلول های خورشیدی و به عنوان حلال های کمکی در تا خوردگیپروتئین ها مورد بررسی قرار گرفته اند [۱]. اخیرا مطالعات زیادی برای بررسی ترمودینامیکی مایعات یونی در مخلوط های حلالی در ازمایشگاه تحقیقاتی ما انجام شده است. در سال ۲۰۱۹ بررسی های ترمودینامیکی برروی مایع یونی ۱–اتیل ۳–متیل ایمیدازولیوم برمید در مخلوط آب و اتیل کربنات در گستره دمایی ۲۹۸/۲ مای ترمودینامیکی برروی مایع یونی ۱–اتیل ۳–متیل ایمیدازولیوم برمید در مخلوط آب و اتیل کربنات در گستره دمایی ۲۹۸/۲ تعیین شد. هدایت مولار حدی و ثابت تجمع یونی فوز-انساگر با استفاده از توابع ترمودینامیکی محاسبه گردید[۲]. در سال ۲۰۲۰ بررسی های خود را بر روی مایع یونی ۱–اتیل ۳–متیل ایمیدازولیوم برمید در مخلوط آب و اتیل کربنات در گستره دمایی ۲۹۸/۲ تعیین شد. هدایت مولار حدی و ثابت تجمع یونی فوز-انساگر با استفاده از توابع ترمودینامیکی محاسبه گردید[۲]. در سال ۲۰۲۰ بررسی های خود را بر روی مایع یونی ۱–اکتیل ۳–متیل ایمیدازولیوم برمید در آب و اتانول– ۱–پروپانول در گستره دمایی تعیین شد. هدایت مولار حدی و ثابت تجمع یونی فوز-انساگر با استفاده از توابع ترمودینامیکی محاسبه گردید[۲]. در سال ۱–پروپانول مورد بررسی قرار گرفت[۳]. در سال ۲۰۲۴ بر روی بررسی خواص ترمودینامیکی و انتقالی سیستم سه جزئی ۱–

۲-روش:

اندازه گیری هدایت ویژه برای محلول های سه جزئی شامل مایعات یونی بر پایه ایمیدازولیوم ، ۲-اتوکسی اتانول و آب با ترکیب درصدهای مختلف ، با استفاده از یک مولتی متر (پرولین) در گستره دمایی ۲۹۸/۲، ۲۹۸/۲ (۲۹۸/۳ انجام شد. خروجی مولتی متر به منظور جمع آوری داده ها به یک رایانه شخصی متصل است و همزن مغناطیسی برای اجتناب از تجمع غلظتی و ترموستات



مدل GFL که امکان چرخش آب را دارد به منظور کنترل دمای محلول تحت بررسی استفاده شد. محلولهای استوک از مایع یونی و ۲-اتوکسی اتانول از طریق وزن کردن بوسیله یک ترازوی تجزیهای مدل AND HR-200 با دقت 0.1 میلی گرم و با آب مقطری که هدایت الکتریکی آن کمتر از $\mu s. cm^{-1}$ است، تهیه شد. پس از جمعآوری دادهها، مقادیر تجربی هدایت مولی تعیین شد و سپس کمیتهایی همچون هدایت مولی حدی (Λ) و ثابت تجمع یون بر اساس مدل فوز-انساگر محاسبه شد.

۳-بحث ونتايج:

مطالعه ترمودینامیکی سامانه سه جزئی مایع یونی ۱-هگزیل ۳-متیل ایمیدازولیوم برمید در آب و۲-اتوکسی اتانول با ترکیب درصدهای جرمی و ۲/۵ ، ۵ ، ۷/۵ و ۱۰ درصد در سه دمای ۲۹۸/۲ ، ۲۹۸/۲ و ۳۱۸/۲ کلوین مورد اندازه گیری قرار گرفت. پس از جمع آوری داده ها نمودارهای تغییرات هدایت مولی برحسب مولالیته(شکل ۱) ونمودار های مقایسه ای هدایت مولی برحسب دما مربوط به مخوط حلالی ۱۰درصد (شکل ۲) نشان داده شده است.









نتایج نشان داد دریک دمای ثابت هدایت مولی با افزایش درصد جرمی ۲-اتوکسی اتانول درمخلوط حلالی کاهش می یابد و علت آن افزایش ویسکوزیته حلال بوده که موجب کاهش تحرک یون های موجود در محلول شده و هدایت مولی کاهش می یابد.در یک غلظت ثابت با افزایش دما، تحرک و انرژی جنبشی یون های موجود درون محلول افزایش پیدا می کند، و هدابت مولی محلول افزایش می یابد.

منابع

[1] Sarbjeet, S., Sheelaa, M., Smriti, K., & Rajeev, K., (2012), "A Focus & Review on the Advancement of Green Chemistry", Vol. 2, pp. 397-408.

[2] GhalamiChoobar B. NosratiFallahkar T. (2019), Thermophysical properties of 1-ethyl-3-methylimidazolium bromide ionic liquid in water + ethylene carbonate mixtures at T = (298.2, 308.2 and 318.2) K Fluid phase Equilibria Vol.496 pp.42-60

[3] GhalamiChoobar, B., MeftahNiaki, M. (2020), "Transport and optical

properties of 1 octyl 3 methylimidazolium bromide ionic liquid in water+Ethanol/1 propanol mixtures at T= (298.2,308.2,318.2) K", Journal of Molecular Liquids, Vol.303, pp.112-116.

[4] Forough, Z., Ghalami, B., &Ashtari, M. (2024), Study of Thermodynamic and Transport Properties of the Ternary System (1-Hexyl-3-Methylimidazolium Bromide + Ethanol + Water) Based on Potentiometric and Conductometric Measurements, Journal of Chemical & Engineering Data, Vol. 54, pp.101-107.



مطالعه کوانتومی بر روی موقعیت های اتمی متفاوت و تغییر خواص الکترونی ملکول پنتاسن

محمد حسین حورزاد'، پوریا فرجیان'، مهدی ظریف^{۳٬*}

۱ – دانشجوی کارشناسی ارشد ، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک و شیمی تجزیه، دانشکده شیمی و نفت دانشگاه شهید بهشتی، mohoho1999@gmail.com

۲- دانشجوی کارشناسی ، شیمی کاربردی، دانشکده شیمی و نفت دانشگاه شهید بهشتی، pooryafarajian22@gmail.com ۳- استاد یار ، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک و شیمی تجزیه، دانشکده شیمی و نفت دانشگاه شهید بهشتی، m_zarif@sbu.ac.ir

واژگان کلیدی: پلی سایکلیک هیدروکربن، آسن، نظریه تابع چگال، مکانیک کوانتم ملکولی.

۱– مقدمه

در سال های اخیر با توجه به پیشرفت بشریت و افزایش نیاز آن به فناوری های جدید، مواد نیمه رسانا اهمیت ویژه ای را برخوردار شدهاند. یک دسته از مواد نیمه رسانا مهم که در سال های گذشته بسیار مورد توجه قرار گرفته است، مواد نیمه رسانای آلی (OSC) هستند. این دسته از مواد در زمینه های مختلفی از صنعت الکترونیک و نوری (اوپتیک) کاربرد دارند مانند دیودهای نشردهنده نوری، سلولهای فتوولتایی آلی و ترانزیستورهای آلی حساس به میدان [۱]. علاوه بر کاربرد های متنوع OSC ها، به دلیل هزینه ساخت مناسبتر، وزن کمتر، انعطاف پذیری بیشتر و مقاومت مکانیکی بالاتر نیز مورد علاقه دانشمندان جهت مطالعه قرار گرفته اند [۲و۳]. ملکول پنتاسن به عنوان یکی از مواد پلی سایکلیک هیدروکربنها شناخته میشود. این ترکیب دارای درجه خوبی از اوربیتالهای پای مزدوج شده است و همین باعث انتخاب آن به عنوان یک گزینه مناسب نیمه رسانای آلی میشود. ویژگیهای مناسب پنتاسن باعث مطالعه بر روی سنتز آن شده و روشهایی برای ساخت بهتر این ماده نیز معرفی شده است [۴–۶]. در این مطالعه بررسی و مطالعه بر روی سنتز آن شده و روشهایی برای ساخت بهتر این ماده نیز معرفی شده رای کاربردهای الکترونی پرداخته شده است. به منظور پیدا کردن مشتقهایی با کارایی بالاتر پنتاسن، در این مطالعه سعی شده است ایک رایردهای الکترونی پرداخته شده است. به منظور پیدا کردن مشتقهایی با کارایی بالاتر پنتاسن، در این مطالعه سعی شده رای کاربردهای الکترونی پرداخته شده است. به منظور پیدا کردن مشتقهایی با کارایی بالاتر پنتاسن، در این مطالعه سعی شده

۲- روش محاسباتی

در مطالعه انجام شده از روش نظریه تابع چگالی (DFT) و توابع پایه (۶۳۱۱++g(d,p استفاده شده است. از روش مذکور جهت بهینه سازی هندسه ساختار ها و محاسبه انرژی اوربیتالهای ساختارها و از برنامه Multiwfn برای سایر آنالیز ها استفاده شده است.

۳- بحث و نتیجه گیری

شکل ۱ نشان دهنده ساختار بهینه شده پنتاسن و عدد گذاری آن است. بر اساس این شکل و نحوه شماره گذاریهای تایید شدهی IUPAC آسن ها [۷] ساختارهایی را برای مشتق سازی پنتاسن به کمک گروههای الکترون کشنده دی متیل آمین انجام شده است. اطلاعات الکترونی آن ها شامل انرژی بالاترین اوربیتال اشغال شده (HOMO)، پایین ترین اوربیتال اشغال نشده (LUMO) و فاصله انرژی این دو از هم (Eg)، در جدول ۱ آماده شده است.

عهان ۲۹ و ۳۰ بان ۳۰۳



شکل ۱: شکل الف) ساختار بهینه ملکول ینتاسن شکل ب) شماره گذاری IUPAC ینتاسن

جدول ۱: ستون اول مقاله نشان دهنده تعداد گروه دی متیل آمین درون پرانتز و سایر اعداد نشان دهنده کربن های دارای این گروه های عاملی می باشند

E _g (eV)	LUMO(eV)	HOMO(eV)	نام یا شماره کربن های پتاسن
۲.۲۳	-7.89	-4.92	پنتاسن
۲.۲۲	-7.81	-4.83	(۴)۲و۳و۱۰و۹ پنتاسن
7.14	-7.87	-4.46	(۴)۱و۴و۸و۱۱ پنتاسن
1.98	-7.87	-4.34	(۴)۵و۷و۱۲و۱۴ پنتاسن

بر اساس اطلاعات ویژگی های الکترونی نمایش داده شده در جدول ۱، مناسبترین موقعیتها جهت قرارگیری ساختارهای الکترون فعال برای تاثیر گذاری بیشتر بر روی ساختار الکترونی کربن های ۵، ۷، ۱۴، ۱۴ هستند. این بر خلاف کربن های ۱ تا ۴ و ۸ تا ۹ است که تاثیر به سزایی بر روی ساختار های الکترونی ملکول پنتاسن نمی گذارند.

[1]Zhang, Y., & Wang, Y. (2022). Advances in flexible organic field-effect transistors and their applications. *Nature Reviews Materials*, 7(1), 1-19.

منابع

[2] Liu, Y., & Wang, Y. (2018). Mechanical properties of organic semiconductors for stretchable, highly flexible, and mechanically robust electronics. *Chemical Reviews*.

[3] Patsnap. (2024). Organic semiconductors: New advances, apps, & prospects. Retrieved from <u>https://www.patsnap.com/resources/blog/organic-semiconductors-recent-advances-applications-and-future-prospects/</u>

[4] Pilevar Shahri, R., Mousavi, S. S., & Benam, M. R. (2019). The electronic and optical properties of pristine, fluorinated and chlorinated pentacene molecules: An ab-initio study.

[5] Bhatia, R., Wadhawa, D., Gurtu, D., Gaur, G., Gupta, J., & Gupta, D. (2019). Methodologies for the synthesis of pentacene and its derivatives. *Journal of King Saud University - Science*, 31(1).

[6] Wu, M.-X., Li, Y., Liu, P., Shi, P., Kang, X., Zhao, H., Xu, X.-L., Li, L., Fang, X., & Yang, H.-B. (2023). Functionalization of pentacene: A facile and versatile approach to contorted polycyclic aromatic hydrocarbons.
[7] IUPAC. (2013). Nomenclature of Organic Chemistry: IUPAC Recommendations 2013. Oxford: Royal Society of Chemistry.





کبری فراهانی'، پانته آ عزیز'، مهدی ظریف^{۳*}

۱ - دانشجوی کارشناسی ارشد شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی (grail.com) (farahanii 1994@gmail.com)
 ۲ - دانشجوی دکتری شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی (azizi_pantea92@yahoo.com)
 ۳ - حضو هییت علمی، دانشگاه شهید بهشتی (m_zarif@sbu.ac.ir)

واژگان کلیدی: نانولوله نیتریدبور، داکسوروبیسین، کیتوسان، پلی اتیلن گلایکول، پلی ال لایزین، فولیک اسید، شبیه سازی دینامیک مولکولی

۱– مقدمه

این روزها سیستمهای دارورسانی مبتنی بر نانوذرات پیشرفت قابل توجهی در زمینه پزشکی، بهویژه برای هدف قرار دادن بیماریهای سخت درمان مانند سرطان است داشته اند [۱]. نانولولههای نیترید بور به دلیل خواص منحصر به فرد خود به عنوان یکی از نوآورانهترین نانومواد در زمینه پزشکی و دارورسانی مورد توجه قرار گرفتهاند. این نانومواد،نانوساختارهای لولهای یک بعدی هستند که از الگوهای پیوند هگزاگونال بور و نیتروژن تشکیل شدهاند [2]. یکی از مهمترین ویژگیهای این نانولولهها میاثر بودن آن ها از لحاظ شیمیایی است. این نانومواد دارای سطح بزرگی هستند که امکان جذب و حمل مقدار زیادی از مولکول های دارویی را فراهم می کند. نانولولههای نیترید بور مانند نانولولههای کربنی حلالیت بسیار کمی در محیطهای آبی دارند. برای پایداری آن ها در محیطهای آبی عاملدار کردن آنها ضروری است. این نانولولهها را براساس برهمکنش با مولکولهای زیستی و جذب فیزیکی، عاملدار کرد [۳]. مطالعات نشان دادهاند که نانولولههای اور ایتری کووالانسی و عامل دارسازی غیر کووالانسی مانند داکسوروبیسین (که در درمان انواع سرطان ها به روش شیمی درمانی مورد استفاده قرار می گیرند) را محصور کنند و به سایند داکسوروبیسین (که در درمان انواع سرطان ها به روش شیمی درمانی مورد استفاده قرار می گیرند) را محصور کنند و به مانند داکسوروبیسین (که در درمان انواع سرطان ها به روش شیمی درمانی مورد استفاده قرار می گیرند) را محصور کنند و به مانند داکسوروبیسین (که در درمان انواع سرطان ها به روش شیمی درمانی مورد استفاده قرار می گیرند) را محصور کنند و به مانند داکسوروبیسین (که در درمان انواع سرطان ها به روش شیمی درمانی مورد استفاده قرار می گیرند) را محصور کنند و به

۲- روش

۲-۱- ساختارهای اولیه

ابتدا سه نانولوله نیترید بور با کایرالیته (۱۴،۱۴)، قطر[°]A ۹.۶۲۵ و طول ۳ نانومتر با نرم افزار نانوتیوب مودلر طراحی شد. بعد از آن گروههای عاملی هیدروکسیل و آمین با نرم افزار آووگادرو روی سطح نانولوله قرار داده شدند. برای عامل دار کردن سطح نانولولهها، با حذف یک نیتروژن در سطح، سه اتم بور غیر اشباع ایجاد میشود که به هرکدام از آن ها گروههای عاملی هیدروکسیل و آمین متصل می گردد [۵]. محاسبات DFT با تئوری B3LYP با مجموعه پایه (b-31G++p,d) روی یک نانولوله در مقیاس کوچکتر اعمال شد تا تخمین مناسبی برای بارهای جزئی کل سیستم باشد [۶].

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ تان ۱۴۰۳

۲-۲- شبیه سازی

تمام شبیه سازی ها در این پژوهش با استفاده از بسته نرم افزاری گرومکس انجام شد. همچنین برای توصیف برهمکنش های پیوندی و غیر پیوندی از فورس فیلد GROMOS54a7 استفاده شد [۷]. برای بهینه سازی انرژی و تخمین توابع دانسیته الکترونی قبل از شروع محاسبات دینامیک مولکولی از نرم افزار گوسین استفاده شد. برای هر سیستم، نانولوله ها در مرکز و ۱۲ مولکول دارو به صورت تصادفی درون یک جعبه شبیه سازی با بعاد ۹×۶×۶ نانومتر قرار گرفتند. بعد از افزودن عوامل کووالانسی مولکول دارو به صورت تصادفی درون یک جعبه شبیه سازی با بعاد ۹×۶×۶ نانومتر قرار گرفتند. بعد از افزودن عوامل کووالانسی به نانولوله ها، هر سه نانولوله ی خام و عامل دارشده با هیدروکسیل و آمین با پلیمرهای پلی ال-لایزین، پلی اتیلن گلایکول، به نانولوله ها هر سه نانولوله ی خام و عامل دارشده با هیدروکسیل و آمین با پلیمرهای پلی ال-لایزین، پلی اتیلن گلایکول، در حلال برای کمینه سازی انرژی تمام سیستم ها الگوریتم تندترین کاهش مورد استفاده قرار گرفت. برای نزدیک شدن شبیه حلال، برای کمینه سازی انرژی تمام سیستم با هنگرد TVT و ترموستات تغییر مقیاس سرعت روی گرول، مانولوله ی خام و عامل دارشده با هیدروکسیل و آمین با پلیمرهای پلی ال-لایزین، پلی اتیلن گلایکول، حلال، برای کمینه سازی انرژی تمام سیستم ها الگوریتم تندترین کاهش مورد استفاده قرار گرفت. برای نزدیک شدن شبیه سازی به شرایط آزمایشگاهی دمای سیستم با هنگرد TVT و ترموستات تغییر مقیاس سرعت روی MI ترمانی سیسیتم با هنگرد TVT و برموستات تنییم مورد استفاده قرار گرفت. برای نزدیک شدن شبیه سازی به شرایط آزمایشگاهی دمای سیستم با هنگرد TVT و ترموستات تغییر مقیاس سرعت روی TI کام زمانی

۳- بحث و نتیجه گیری

آنالیز تعداد تماس

در این آنالیز تعداد تماسهای بین نانولولهها و مولکولهای دارو در حضورتمام عوامل غیرکووالانسی بررسی شد. بیشتر شدن تعداد تماس بین نانولوله و دارو بیانگر برهمکنش قویتر و سازگاری سطحی بیشتر آن هاست. درهر قسمت، سیستمهایی که در آن ها مولکولهای دارو به درون نانولوله نفوذ کردهاند تعداد تماس بیشتری را نشان میدهند. کاهش تعداد تماسهای بین نانولولهها و مولکولهای حلال نشان میدهد، که مولکولهای دارو جذب نانولوله ها شده و جایگزین مولکولهای آب شده اند.

آناليز پتانسيل لنارد جونز

با توجه به بررسی برهمکنش پتانسیل لنارد- جونز بین هر سه مدل از نانولولهها و داروی داکسوربیسین برای همه سیستم ها، مشخص شد که مولکولهای پلیمر به سمت نانولوله حرکت کرده و به آن نزدیک میشوند. منفی بودن مقدار پتانسیل بیانگر گرماده بودن جذب دارو روی حاملها است. با توجه به شکل ۱، در بین تمامی سیستمها برهمکنش دارو با نانولولهی خام در حضور پلیمر کیتوسان از همه بیشتر و مقدار لنارد- جونز منفیتری را نشان میدهد زیرا در این حالت تعداد زیادی از داروها به داخل نانولوله نفوذ کرده و با اتمهای بیشتری احاطه میشوند. باتوجه به تعداد مولکول های دارویی نفوذ کرده به درون نانولوله، مشاهده شد که وقتی فولیک اسید و PEG در محیط بود گروه عاملی NH² باعث لنارد- جونز منفیتر نانولوله و دارو میشود. درصورت وجود پلیمر LD و CS در محیط گروه OH این پتانسیل را تقویت میکند.

آناليز پيوند هيدروژني

به طور کلی حضور گروه عاملی کووالانسی روی نانولوله ها باعث افزایش تعداد پیوندهای هیدروژنی میشود. از طرفی در نانولوله های هیدروکسیلی به علت حضور اتم اکسیژن که الکترونگاتیویته بالاتری نسبت به نیتروژن نانولوله های آمینی دارد، مقدار پیوند

فولیک اسید چون دارای چندین گروه عاملی هیدروژن دوست شامل کربونیل، آمین و هیدروکسیل است که می توانند به طور قابل توجهی با نانولوله و دارو از طریق پیوند هیدروژنی برهمکنش کنند، باعث سهم بیشتر پیوند هیدروژنی با دارو میشود.



شكل ۱: نمودار پتانسيل لنارد جونز نانولولهها با دارو

در حضور پلی اتیلن گلایکول که ساختاری انعطاف پذیر با واحدهای تکرار شونده اتری دارد، گروه های اتر می توانند به عنوان پذیرنده پیوند هیدروژنی عمل کنند و باعث پیوند هیدروژنی قابل توجهی میشوند. درحضورکیتوسان هم هرچند مقدار پیوند هیدروژنی کمتر از فولیک اسید است، اما گروه های آمینی و هیدروکسیلی پلیمر باعث ایجاد پیوند هیدروژنی می شوند.

انرژی کل

با مقایسه سهم های برهمکنشی واندروالسی و الکترواستاتیکی نانولوله ها و مولکول های دارو دریافتیم که، سهم برهمکنش های واندروالسی برای تمامی سیستم ها بسیار بارزتر از الکترواستاتیکی است و نقش اصلی را در بارگذاری و جذب دارو ایفا می کند. جدول ۱ مقدار انرژی کل سیستم را نشان میدهد.با بررسی تغییرات انرژی کل، مشخص شد که نانولوله های خام و هیدروکسیلی در حضور کیتوسان و نانولوله های آمینی در حضور مولکول فولیک اسید تمایل به رسیدن به یک انرژی کل پایینتر داشته اند.

	CS	FA	PEG	PLL
p-BNNT	-2000.13	-1569.62	-1334.36	-1590.45
OH-BNNT	-1658.72	-1021.77	-1294.65	-1555.93
NH ₂ -BNNT	-1457.761	-2065.68	-1719.049	-945.816

جدول۱: مقدار انرژی کل بین نانولوله های حامل و دارو

نتيجه گيرى

مطالعات انجامشده در این پژوهش نشان داد که نوع عامل دارکردن نانولولهها و استفاده از پلیمرهای مناسب نقش کلیدی در بهبود فرآیند بارگذاری دارو دارد. باتوجه به محاسبه انرژی کل سیستم ، پلیمرهای کیتوسان و فولیک اسید به عنوان عوامل غیرکوالانسی و گروه آمین به عنوان عامل کووالانسی در شرایط مختلف بهترین عملکرد را در بارگذاری دارو نشان دادند. با این حال، بررسیهای دقیق تر نشان که نوع عامل دارسازی نانولولهها (آمینی یا هیدروکسیلی) و همچنین نوع پلیمر مورد استفاده، تأثیر مستقیمی بر انرژی کل سیستم و در نتیجه بر پایداری برهم کنشهای دارو و نانولوله دارند. با توجه به این نتایچ، میتوان نتیجه گرفت که در حضور برخی پلیمرها، نانولولههای آمینی در برهم کنش با دارو و پلیمرها پایدارتر هستند، در حالی که در موارد دیگر، نانولولههای خام یا هیدروکسیلی عملکرد بهتری دارند . بنابراین، انتخاب نوع نانولوله و پلیمر برای بهبود کارایی بارگذاری دارو، بستگی به ماهیت شیمیایی و ساختاری هر یک دارد.

منابع و مراجع

- Goldberg M, Langer R, Jia X. Nanostructured materials for applications in drug delivery and tissue engineering. J Biomater Sci Polym Ed. 2007 Jan 2;18(3):241–68.
- 2. Cohen ML, Zettl A. The physics of boron nitride nanotubes. Phys Today. 2010 Nov 1;63(11):34-8.
- Roohi H, Ghauri K, Salehi R. Non-covalent green functionalization of boron nitride nanotubes with tunable aryl alkyl ionic liquids: A quantum chemical approach. J Mol Liq. 2017 Oct;243:22–40.
- 4. Hulla J, Sahu S, Hayes A. Nanotechnology. Hum Exp Toxicol. 2015 Dec 26;34(12):1318-21.
- 5. Ciofani G, Genchi GG, Liakos I, Athanassiou A, Dinucci D, Chiellini F, et al. A simple approach to covalent functionalization of boron nitride nanotubes. J Colloid Interface Sci. 2012 May;374(1):308–14.
- García-Toral D, González-Melchor M, Rivas-Silva JF, Meneses-Juárez E, Cano-Ordaz J, H. Cocoletzi G. Dopamine and Caffeine Encapsulation within Boron Nitride (14,0) Nanotubes: Classical Molecular Dynamics and First Principles Calculations. J Phys Chem B. 2018 Jun 7;122(22):5885–96.
- 7. Schmid N, Eichenberger AP, Choutko A, Riniker S, Winger M, Mark AE, et al. Definition and testing of the GROMOS force-field versions 54A7 and 54B7. European Biophysics Journal. 2011 Jul 30;40(7):843–56.



مطالعهی کوانتومی روی نانو حلقه ها به روش نظریهی تابع چگالی

مهرزاد مولوی'، محمد حسین حورزاد ^۲، مهدی ظریف^{۳ ،*}

۱ – دانشجوی کارشناسی ، شیمی کاربردی، ، دانشکده علوم شیمی و نفت دانشگاه شهید بهشتی mehrzadmlv@gmail.com ۲ – دانشجوی کارشناسی ارشد ، شیمی محاسباتی، شیمی فیزیک، دانشکده علوم شیمی و نفت دانشگاه شهید بهشتی Mohoho1998@gmail.com ۳ – استادیار، شیمی فیزیک،دانشکده علوم شیمی و نفت دانشگاه شهید بهشتی m zarif@sbu.ac.ir

واژگان كليدى: نانو حلقه، نظريه تابع چگالى، آروماتيسيته

۱– مقدمه

مولکولهای سیکلوپارافنیلن (CPP) که اغلب به عنوان "حلقههای نانو کربنی" شناخته می شوند، بخشی از نانولولههای کربنی (CNTs)هستند. این مولکولها معمولاً برای بررسی خواص شیمیایی و فیزیکی نانولولههای کربنی مورد مطالعه قرار می گیرند. این مولکولها هیدروکربنهای حلقوی مزدوج هستند که از حلقههای بنزن تشکیل شدهاند و در موقعیتهای پارا به هم متصل شدهاند. آنها دارای ویژگیهای الکتریکی و نوری هستند که می توان آنها را با تغییر قطر تنظیم کرد. مولکولهای CPP کوتاهترین بخش دیواره جانبی ساختارهای نانولوله کربنی صندلی گون(Armchair) هستند و حفرههای نانومقیاسی دارند که می توانند برای ساخت مواد گرافیتی فرامولکولی استفاده شوند. در این پژوهش مطالعه ی کوانتومی روی نانو حلقه ها در اندازه های متفاوت (۱۰، ۱۲، ۱۴، ۶۰) انجام شده است. هدف از انجام این پژوهش آن است که بهترین روش بهینه سازی هندسی از طریق آنالیز آروماتیسیته سنجیده شود. همچنین برای تشخیص خواص الکترونیکی از نظریه تابع چگالی (Density)

۲-روش

ساختارهای نانو حلقوی ابتدا با نرم افزار Avogadro طراحی و هندسه یآنها بهینه سازی شد. بهینه سازی اصلی به روش نظریه تابع چگالی انجام شد. برای بهینه سازی از تابع b3lyp استفاده شده است. برای محاسبه ی حالت الکترونی از تابع چگالی انجام شد. برای بین برای بیشتر برای ساختارهایی با ساختار مزدوج بلند استفاده می شود. برای بررسی اینکه تابع چگالی متقارن بهینه سازی شده باشند، آنالیز آروماتیسیته مالال مزدوج بلند استفاده می شود. برای بررسی اینکه ساختارها به شکل متقارن بهینه سازی شده باین برای ساختارهایی با ساختار مزدوج بلند استفاده می شود. برای بررسی اینکه ساختارها به شکل متقارن بهینه سازی شده باشند، آنالیز آروماتیسیته مالال الم مد. طبق فرمول ۱ این آنالیز تنها به ساختارها به شکل متقارن بهینه سازی شده باشند، آنالیز آروماتیسیته مولکول است که می تواند از طریق محاسبات یا طول پیوند وابستگی دارد. در این فرمول آ طول پیوند کربن-کربن در یک سیستم کاملاً آروماتیک است. اگر همه طولهای پیوند آزمایشات تجربی تعیین شود. باری تماول بهینه پیوند کربن-کربن در یک سیستم کاملاً آروماتیک است. اگر همه طولهای پیوند آزمایشات ترم یا این طول بهینه باشند، مقدار محال برابر با ۱ خواهد بود که نشاندهنده یک سیستم کاملاً آروماتیک است. اگر همه طولهای پیوند مورتی کربن در یک سیستم کاملاً آروماتیک است. اگر همه طولهای پیوند مورتی که مقدار با ۱ خواهد بود که نشاندهنده یک سیستم کاملاً آروماتیک است. در یورتی که مقدار HOMA برای تمامی حلقه ها مقدار یکسانی شود، بدان معنی است که طول و هندسه ی مامی مونومرها یکسانی است و ساختارها به شکل درست و متقارن بهینه سازی شده اند.



۳- بحث و نتیجه گیری

در طی بهینه سازی هندسی حلقه های نانویی، این ترکیبات به ساختار های منظم و متقارن تبدیل شدند (شکل ۱).



شکل۱: ساختار بهینه سازی شدهی نانوحلقهی ده تایی

همان طور که در شکل ۲ مشاهده می شود، نتایج آنالیز آروماتیسیته برای تمامی ساختارها تقریباً مشابه به دست آمده است. با اینکه در برخی نواحی افت و خیزهایی دیده می شود، به طور کلی مقدار HOMA ثابت و پایدار است. با توجه به اینکه آنالیز HOMAبه طول پیوندها وابسته است، مقادیر مشابه این آنالیز برای حلقههای مختلف نشان می دهد که طول پیوندها در تمامی ساختارها یکسان بودهاند. این یکسانی طول پیوندها حاکی از دقت و صحت روش انتخابی برای بهینه سازی هندسی ساختارهای نانو حلقه ای است.



شکل ۲: تغییرات میزان HOMA بر اساس تعداد حلقه

منابع و مراجع

[1] Enrique M. Arpa, and Bo Durbeej. (2023). HOMER: a reparameterization of the harmonic oscillator model of aromaticity (HOMA) for excited states. Physical Chemistry Chemical Physics, 22(42), 24431-24445. [2] Shigeru Yamago, Eiichi Kayahara, Takahiro Iwamoto. (2014). Organoplatinum-Mediated Synthesis of Cyclic π -Conjugated Molecules: Towards a New Era of Three-Dimensional Aromatic Compounds. The Chemical Record.



[3] Katsuma Matsui, Yasutomo Segawa, Tomotaka Namikawa, Kenji Kamada and Kenichiro Itami. (**2013**). Synthesis and properties of all-benzene carbon nanocages: a junction unit of branched carbon nanotubes. Chemical Science.

[4] Jianlong Xia, Jeffrey W. Bacona and Ramesh Jasti. (2012). Gram-scale synthesis and crystal structures of and [10]CPP, and the solid-state structure of C60@[10]CPP. Chemical Science.



۲-روش

در تحقیق حاضر، از یک رویکرد ترمودینامیکی برای توضیح رفتار پروتئین های گوشت شتر در شرایط محیطی متفاوت استفاده شد.از آنجایی که پارامتر برهمکنش در نظریه کلاسیک فلوری-رنر برای بررسی خواص مد نظر کافی نیست لذا بسط سری های این پارامتر با توجه به کسر حجمی پروتئین برای ارتقا این نظریه مورد استفاده قرار گرفت.از رابطه زیر برای محاسبه فشار اسمزی الاستیک استفاده شد [2]

$$\Pi_{el} = \frac{N_c k_{\rm B} T}{V_0} \left[\frac{\phi_a + \phi_b}{2\phi_0} - \left(\frac{\phi_a + \phi_b}{\phi_0} \right)^{1/3} \right]$$

همچنین از مدل هیل برای بررسی پارامتر برهمکنش بین حلال (آب) و پروتئین استفاده گردید.

$$\chi(t) = \chi_0 + a(t - t_a) + b \frac{t_{rel}^{\nu}}{t_{rel}^{\nu} + K}$$

۳-بحث و نتیجه گیری

با استفاده از معادلات، محاسبات عددی انجام شد که توافق بسیار خوبی با داده های تجربی موجود در پژوهش های مرتبط داشتند که این امر نشان دهنده اینست که معادله توسعه یافته فلوری-رنر برای بررسی خواص شیمی فیزیکی پروتئین گوشت (پلیمر طبیعی)همانندفعالیت، ضریب اسمزی،پارامتر برهمکنش،توصیف جریان رطوبت مایع و ... معتبر و کاربردی است.[3]

پارامتر برهمکنش	فعاليت آب	pН	رطوبت ٪	دما (سانتی گراد)
۸۹۲.۰	۰.۵۲	۶/۰۸	۲۰	۵۵
۰.۲۱۳	• .97	۶/۱	74	
۰.۲۶۹	۸۵. •	۵/۷	۲۰	۶۵
۲۳۷. ۰	۰.۶۷	۵/۹	74	
۵۸۲.۰	۰.۶۱	۵/۶	۲۰	۷۵
• .787	٧. •	$\Delta/\Lambda V$	74	

جدول۱- پارامتر برهمکنش،فعالیت آب،pH و زطوبت پروتئین در دماهای مختلف



شکل۱- ظرفیت نگهداری آب گوشت شتر در دماهای مختلف



منابع ومراجع

[1] Lee, S-W., & Kang, C-S. (2003). WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim. Nahrung/Food 47 (5), 330 – 333.

[2] Friesen, S., & Kakorin, S., & Hellweg, T. (2022). Polymers (14), 1999.1-16.
[3] van der Sman, R.G.M. (2007). Meat Science (76), 730–738



بررسی پارامترهای ترمودینامیکی محلول آبی NaCl-RbCl-LiCl با استفاده از مدل برهمکنش یونی پیتزر

مریم عابدی* استادیار،رشته شیمی فیزیک،دانشکده علوم پایه،دانشگاه ملی مهارت m.abedi85@gmail.com

واژگان كليدى: مدل پيتزر، ضريب فعاليت، فشار اسمزى، الكترودهاى يون گزين

۱– مقدمه

محلول های آبی الکترولیت معمولا حاوی دو جز حل شونده یا بیشتر هستند. بنابراین مطالعه ویژگی های ترمودینامیکی محلول های الکترولیت مخلوط آبی در قدرت های یونی بالا در زمینه های اقیانوس شناسی شیمیایی،نمک زدایی آب دریا، محاسبات ژئوشیمیایی و فرآیندهای صنعتی مورد توجه بسیاری از دانشمندان است [1]. همچنین با ظهور و توسعه حسگرها و غشاهای انتخابی جدید، الکترودهای یون گزین به یک روش جایگزین جذاب برای روش های معمول بررسی فشار بخار یا فعالیت حلال برای بررسی ویژگی های ترمودینامیکی سیستم های الکترولیتی تبدیل شده اند.

۲- روش

در تحقیق حاضر، از از روش پتانسیومتری برای بدست آوردن داده های تجربی و محاسبه ضریب فعالیت یونها در محلول الکترولیت استفاده گردید. برای اندازه گیری پتانسیل، الکترود یون مد نظر در مقابل الکترود مرجع Ag-AgCl قرار داده شد و معادله هندرسون برای محاسبه پتانسیل اتصال مایع به کار برده شد. تصویر زیر شمایی از دستگاه مورد استفاده برای اندازه گیری داده های تجربی است.[2]



برای محاسبه ضرایب اسمزی و سایر ویژگی های ترمودینامیکی مرتبط برای سیستم الکترولیتی مورد مطالعه از مدل برهم کنش یونی پیتزر استفاده شد.[3]
$\phi - 1 = \frac{2}{\sum_{i} m_{i}} \left\{ -\frac{A_{\phi}I^{3/2}}{1 + 1.2\sqrt{I}} + m_{\mathrm{Na}}m \left[B_{\mathrm{NaCl}}^{\phi} + mC_{\mathrm{NaCl}}^{\phi} \right] + m_{\mathrm{Cs}}m \left[B_{\mathrm{CsCl}}^{\phi} + mC_{\mathrm{CsCl}}^{\phi} \right] \right. \\ \left. + m_{\mathrm{Li}}m \left[B_{\mathrm{LiCl}}^{\phi} + mC_{\mathrm{LiCl}}^{\phi} \right] + m_{\mathrm{Na}}m_{\mathrm{Cs}} \left[\theta_{\mathrm{NaCs}} + m\psi_{\mathrm{NaCsCl}} \right] \right. \\ \left. + m_{\mathrm{Na}}m_{\mathrm{Li}} \left[\theta_{\mathrm{NaLi}} + m\psi_{\mathrm{NaLiCl}} \right] + m_{\mathrm{Cs}}m_{\mathrm{Li}} \left[\theta_{\mathrm{CsLi}} + m\psi_{\mathrm{CsLiCl}} \right] \right\}$

دانسکاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

. سمي فنريك إيران

۳- بحث و نتيجه گيري

با استفاده از روش پتانسیومتری داده های تجربی برای سیستم الکترولیتی محلول نمک های NaCl-RbCl-LiCl به دست آمد و با کاربرد مدل برهم کنش یونی پیتزر ضریب اسمزی و سایر ویژگی های ترمودینامیکی مرتبط محاسبه شدند. نتایج حاصله تطابق منطقی و درستی با هم داشتند. هم چنین ضریب تاثیر اثر غشای الکترود یون گزین بر اندازه گیری های پتانسیومتری مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. با بررسی های به عمل آمده، می توان چنین نتیجه گرفت که نقش تداخلی یونها در اندازه گیری های ISE را می توان با انتخاب کسر مولی بالا از سیستم های الکترولیت متعادل کرد.

,	•		0 2			
m _{NaCl}	m RbCl	mliCl	Ι	K	aw	Φ
۵. ۰	۰.۲	۰.۲	۰.۹	۱۱۸۱۱	۵۸۹.۰	۰.۹۱۱
۷. ۰	۳. ۰	۳. ۰	۱.۳	۱.۵۸۶	۰.۹۶	۰.۹۳۳
۰.٩	۴.۰	۴. ۲	۱.۷	۱.۳۹۷	• .9٣٩	۰.۹۶۱
۱.۱	۵. •	۵. •	۲.۱	1.780	• .97٩	۰.۹۸۱
۱.۳	۶. ۰	۶. ۶	۲.۵	1.180	۰.۹۱۶	1۳
۱.۷	٨. •	٨. •	۳.۳	1.077	۰.۸۷۹	۱.۰۰۵
۲.۱	١	١	4.1	1.014	۴۵۸. ۰	1.104
۵.۲	۱.۳	۱.۳	۵.۱	•.940	۲۸. ۰	1.177
٣	۱.۶	۱.۶	۶.۲	٠.٩١٠	۰.۷۷	1.701

جدول۱- ضريب اسمزي،فعاليت آب و قدرت يوني در مولاليته هاي مختلف سيستم الكتروليتي



شکل۱- نمودار تغییرات ضریب اسمزی در مقابل قدرت یونی

374



منابع و مراجع

[1] Robinson, R.A. & Stokes, R.H. (1970) Electrolyte Solutions, 5nd ed., Butterworths, London,

[2] Wilczek-Vera, G. & Rodil, E. & Vera, J. H. (2004) on the activity of ions and the junction potential: Revised values for all data. *AIChE J.* 50, 445–462.

[3] Pitzer, K. S. (1973). Thermodynamics of Electrolytes. I. Theoretical Basis and General Equations. J. Phys. Chem. (77) 268–277.



استفاده از مدل توسعه یافته UNIQUAC برای بررسی تعادل فازی و پارامترهای برهم کنش در سیستم های آبی حاوی غیرالکترولیت

مریم عابدی* استادیار،رشته شیمی فیزیک،دانشکده علوم پایه،دانشگاه ملی مهارت m.abedi85@gmail.com

واژگان كليدي: مدل توسعه يافته UNIQUAC، تعادل فازي، سيستم هاي غيرالكتروليتي، پارامتر برهم كنش

۱– مقدمه

مدلسازی سیستم های الکترولیت به ویژه سیستم های مخلوط الکترولیت-حلال از اهمیت ویژه ای برخوردار است زیرا در بسیاری از فرآیندها یافت می شوند. فرآیندهای حاوی سیستمهای مخلوط الکترولیت-حلال همانند بازیابی حلال ها، کریستالیزاسیون استخراجی و استخراج مایع-مایع برای مخلوط های نمکی می باشد. با بررسی های دانشمندان تاکنون چندین مدل ترمودینامیکی برای بررسی تعادل بخار-مایع در سیستم های مخلوط الکترولیت-حلال معرفی شدند. در مطالعه حاضر، از مدل توسعه یافته بونیکوآک برای توصیف تعادل جامد-مایع-مایع-بخار سیستم های الکترولیت مخلوط و خالص آبی حاوی غیر الکترولیت و بررسی ویژگی های دمایی سیستم های الکترولیت آبی استفاده شد. نمکهای KBr ،NaBr و NaBr به عنوان جزء حل شونده الکترولیتی در حلال آب و ۱-پروپانول و ۲-پروپانول به عنوان غیر الکترولیت در این سیستم مورد بررسی قرار گرفتند.[1]

۲- روش

در تعادل های فازی مایع-مایع،بخار-مایع و جامد-مایع، پتانسیل شیمیایی هر جزء در تمام فازها برابر است. پتانسیل شیمیایی یک جزء مجموع پتانسیل شیمیایی حالت استاندارد و عبارتی است که وابستگی غلظت را توصیف می کند که عبارت دوم با استفاده از مدل یونیکوآک توسعه یافته محاسبه می شود.پتانسیل شیمیایی برای حلال آب و جزء حل شونده با استفاده از رابطه های زیر محاسبه شد:

$$\mu_i = \mu_i^* + RT \ln a_i = \mu_i^* + RT \ln(\gamma_i^* x_i) \qquad \mu_w = \mu_w^0 + RT \ln a_w = \mu_w^0 + RT \ln(\gamma_w x_w)$$

مدل ترمودینامیکی به کار رفته برای بررسی سیستم مورد مطالعه، مدل یونیکوآک توسعه یافته بود. برای محاسبه پارامتر برهم کنش نیز از مدل زیر استفاده گردید[2]



۳- بحث و نتیجه گیری

مدل یونیکوآک توسعه یافته یک مدل ترمودینامیکی خوب برای توصیف رفتار فازی پیچیده سیستم های مخلوط حلال حاوی یک یا چند نمک است که تنها به پارامترهای برهم کنش دوتایی نیاز دارد.[3]

	H2O	1-propanol	Na ⁺	K ⁺	NH4 ⁺	Br⁻
u ⁰	۵۸۵.۸۴	٧١٣.٩	1807	۷۵۰.۱	۶۲۰	1880
u ¹	۰.٧۶٣۴	۵۵۹. ۰	•.9797	1.49	•.•	16.1
	H2O	2-propanol	Na ⁺	K ⁺	NH4 ⁺	Br⁻
u ⁰	۵. ۲۷۰	4.7	1110	١١١٩	۳۵۲.۱	1080
u ¹	۳۸۷. ۰	•.•	•.•	۱.۷۴	1.47	۵.۳۲

جدول۱- پارامترهای برهم کنش مدل یونیکوآک توسعه یافته برای سیستم آبی ۱-پروپانول و ۲-پروپانول



شکل۱- انحلال پذیری آمونیوم برماید در محلول های آبی ۲-پروپانول در دماهای مختلف



منابع و مراجع

[1] Abrams, D.S., Prausnitz, J.M., (1975). Statistical thermodynamics of liquid mixtures: a new expression for the excess Gibbs energy of partly or completely miscible systems. A.I.Ch.E. Journal (21), 116–128.
 [2] Thomsen, K., Rasmussen, P., Gani, R., (1996). Correlation and prediction of thermal properties and phase behavior for a class of aqueous electrolyte systems. Chemical Engineering Science (51), 3675–3683.
 [3] Gomis, A., García-Cano, J., Font, A., Gomis, V., (2019) Journal of Chemical Thermodynamics. (131), 33-39.



سنتز، شناسایی و بررسی عملکرد نانوصفحههای RuCo-MOF تثبیت شده بر روی فوم نیکل برای الکترواکسیداسیون آلانین

ناصر عباس زاده^{او*}، میرقاسم حسینی^۲

۱ - کارشناسی ارشد، نانوشیمی، شیمی فیزیک، مرکز تحقیقاتی الکتروشیمی، سیستمهای تولید و ذخیره سازهای انرژی، شیمی، تبریز (Naser95Abbaszadeh@gmail.com) ۲- استاد، الکتروشیمی، شیمی فیزیک، مرکز تحقیقاتی الکتروشیمی، سیستمهای تولید و ذخیره سازهای انرژی، شیمی، تبریز (mirghasem.h@gmail.com)

واژگان کلیدی: الکترواکسیداسیون، فوم نیکل، نانوصفحه، چارچوبهای فلز-آلی

۱– مقدمه

پیلهای سوختی بهعنوان یکی از تکنولوژیهای پایدار در تولید انرژی، توجه زیادی به خود جلب کردهاند. با این حال، استفاده از الکتروکاتالیستهای بر پایه فلزات گرانبها نظیر پلاتین، چالشهایی از قبیل هزینه بالا و محدودیت در دسترس بودن را به همراه داشته است. به همین دلیل، تحقیقات به سمت توسعه کاتالیستهای ارزانتر با عملکرد بهینهتر سوق یافته است. یکی از این کاتالیستها، چارچوبهای فلز-آلی است که به دلیل تخلخل بالا، سطح ویژه بزرگ و پایداری ساختاری، بهعنوان جایگزینی مناسب برای کاتالیستهای سنتی در نظر گرفته شدهاند. در این پژوهش، نانوصفحههای RuCo-MOF تثبیت شده بر روی فوم نیکل بهعنوان یک کاتالیست کارآمد برای الکترواکسیداسیون آلانین مورد بررسی قرار گرفته است[1,2].

۲- روشها

نانوصفحههای RuCo-MOF از طریق روش سولوترمال با استفاده از پیش سازهای فلزات روتنیوم و کبالت در حضور لیگاند ترفتالیک اسید و حلال دی متیل فرمامید به صورت تک مرحلهای برروی فوم نیکل سنتز و تثبیت شدند. استفاده از بستر فوم نیکل به منظور بهبود رسانایی الکتریکی و افزایش کارایی نانوصفحههای کاتالیست، صورت گرفت. فوم نیکل به عنوان بستر با سطح ویژه بالا، علاوه بر حمایت مکانیکی، نقش مهمی در افزایش فعالیت الکتروشیمیایی کاتالیست ایفا می کند. نانوصفحههای سنتز شده با استفاده از تکنیکهای پراش پرتو ایکس، میکروسکوپ الکترونی روبشی و طیف سنجی مادون قرمز شناسایی شدند. عملکرد الکتروشیمیایی نانوصفحههای RuCo-MOF/NF برای الکترواکسیداسیون آلانین با استفاده از ولتامتری چرخهای، کرونوآمپرومتری و طیف سنجی امپدانس الکتروشیمیایی مورد ارزیابی قرار گرفت[3,4].

۳- بحث و نتیجهگیری

FT-IR استفاده شد. نتایج RuCo-MOF طیفسنجی مادون قرمز برای تأیید گروههای عاملی موجود در نانوصفحههای RuCo-MOF استفاده شد. نتایج FT-IR نشاندهنده حضور پیوندهای مشخص مربوط به لیگاندهای آلی و پیوندهای بین فلز-اکسیژن است. باندهای جذبی در محدوده 1400-1600 cm⁻¹ به ارتعاشات کربوکسیلات مربوط است و باندهای نزدیک به 500 cm⁻¹ نشاندهنده پیوندهای فلز-اکسیژن است. طیفسنجی رامان نشان داد که باندهای مشخصه مربوط به پیوندهای کووالانسی بین فلزات و لیگاندهای آلی در نمونهها حضور دارند. پیکهای قوی در محدوده ^{۱-} com 300-1000 مربوط به ارتعاشات کششی پیوندهای فلز -اکسیژن مربوط است که تأییدکننده سنتز موفق MOF روی فوم نیکل است. تصاویر SEM نشان داد که نانوصفحههای Muco-MOF بهطور یکنواخت بر روی بستر فوم نیکل توزیع شدهاند. تصاویر با بزرگنماییهای مختلف نشان دهنده ساختارهای متخلخل و منظم نانوصفحهها هستند که به افزایش سطح تماس الکترولیت با کاتالیست و بهبود عملکرد الکتروشیمیایی کمک می کنند. همچنین، نتایج SEM نشان داد که نانوصفحههای سنتز شده دارای ضخامت کم و سطح صاف هستند که برای کاربردهای الکتروشیمیایی بسیار مناسب است. آنالیز EDAX برای شناسایی ترکیب عنصری نانوصفحههای RuCo-MOF انجام شد. نتایج نشان دهنده حضور عناصر روتنیوم و کبالت به همراه نیکل از بستر فوم نیکل است. میینگ عناصر نشان داد که این عناصر بهطور یکنواخت در سراس مسطح فوم نیکل توزیع شدهاند. توزیع یکنواخت، عامل مهمی در بهبود عملکرد الکتروکتالیستی نانوصفحهای RuCo-MOF میناصب است. آنالیز RuCo-MOF برای شناسایی ترکیب عنصری نانوصفحههای RuCo-MOF انجام شد. نتایج نشان دهنده حضور محسوب می شود. الگوهای XRD نیکل از بستر فوم نیکل است. میینگ عناصر نشان داد که این عناصر بهطور یکنواخت در سراس محسوب می شود. الگوهای Ruco XI این معمی در بهبود عملکرد الکتروکاتالیستی نانوصفحهای Ruco-MOF است. محسوب می شود. الگوهای XRD نیز نشان ده ده ساختار کریستالی منظم نانوصفحههای Ruco-MOF است. نتایج ولتامتری بررسی کرونوآمپرومتری نیز نشان داد که چگالی حالت پایدار برای Ruco MOF/NF در 20m5 است. Ruco-MOF است. برسی کرونوآمپرومتری نیز نشان داد که چگالی حالت پایدار برای Ruco MOF/NF در 2005 الیست به میزان Ruco-So می و د براین دارای پایداری الکتروکاتالیست Ruco-MOF/NF در 2005 الست. میشود و برسی کرونوآمپرومتری نیز نشان داد که چگالی حالت پایدار برای Ruco MOF/NF در کاتوکاتالیست پایدار در فرآیندهای بانبراین دارای پایداری پایداری قال است که میتواند به عنوان الکتروکاتالیست پایدار در فرآیندهای راکنوی با 2007/NF

منابع و مراجع

[1] Mohammadi, T., Hosseini, M. G., Pastor, E., & Ashassi-Sorkhabi, H. (2024). One-step growth of RuNi-MOF nanoarrays on carbon felt host as a high-performance binder-free electrode for dual application: Ethanol fuel cell and supercapacitor. Journal of Energy Storage, 79, 110146.

[2] Mohammadi, T., Hosseini, M. G., Ashassi-Sorkhabi, H., & Sefidi, P. Y. (2023). Investigating performance of flower-like CoCu-MOF supported on carbon felt as a binder-free anode electrode in direct ethanol fuel cell. Synthetic Metals, 298, 117443.

[3] Mohan, R., Modak, A., Subramanian, P., Cahan, R., Sivakumar, P., Gedanken, A., & Schechter, A. (2020). Electrochemical oxidation of glycine with bimetallic nickel- manganese oxide catalysts. ChemElectroChem, 7(2), 561-568.

[4] Xu, Y., Yu, S., Ren, T., Liu, S., Wang, Z., Li, X., ... & Wang, H. (2020). Hydrophilic/aerophobic hydrogenevolving electrode: NiRu-Based metal-organic framework nanosheets in situ grown on conductive substrates. ACS applied materials & interfaces, 12(31), 34728-34735.
[5] www.msrt.ir



تأثير استخلاف BN بر خواص نوری غيرخطی نانوکاسهی BN تأثير استخلاف

سلماز عبدالهي جونقاني"، زينب بيگلري

۱ و ۱- دکترا، شیمی فیزیک،گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه لرستان (abdollahi.so@fs.lu.ac.ir) ۲- دکترا، شیمی فیزیک،گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه لرستان (biglari.z@lu.ac.ir)

واژگان كليدى: نظريه تابعى چگالى، ويژگى نورى غيرخطى، نانوكاسەى C₂₂H₁₂، الگوى جهت گيرى BN

۱– مقدمه

نانوکاسهها ترکیبات هیدروکربنی چند حلقهای آروماتیک شامل چند حلقهی پنج یا شش کربنی هستند؛ با داشتن دو سطح برآمده و فرو رفته و توزیع نامتقارن الکترونی، ویژگیهای فیزیکی و شیمیایی خاصی از خود نشان میدهند[1]. تاکنون تلاشهای زیادی برای بهبود خواص الکترو-نوری نانوکاسهها انجام شده است. افزایش گشتاور دوقطبی و کاهش تقارن فضایی مولکولها یکی از عوامل مؤثر در بهینه کردن این خواص است. جایگزینی پیوندهای C=C در نانوکاسهها با گروه هم الکترون ولی قطبی تر یکی از عوامل مؤثر در بهینه کردن این خواص است. جایگزینی پیوندهای C=C در نانوکاسهها با گروه هم الکترون ولی قطبی تر یکی از عوامل مؤثر در بهینه کردن این خواص است. جایگزینی پیوندهای SN/CC در نانوکاسههای کورانولن[2] و سومانی [3] میک انجام شده است. وایز می SN/CC در نانوکاسههای کورانولن[2] و سومانی [3] انجام شده است. در یک پیوندهای SN/CC در نانوکاسههای کورانولن[2] و سومانی [3] انجام شده است. و اثر جهتگیری و موقعیت این جایگزینی بر ویژگیهای الکتریکی، ساختاری و نوری آنها بررسی شده است. در این پژوهش، جایگزینی SN/CC در موقعیت این جایگزینی بر ویژگیهای الکتریکی، ساختاری و نوری آنها بررسی شده است. در مینه در موامل است. در می مولکول ها رو این (3] و سومانی [3] انجام شده است و اثر جهتگیری و موقعیت این جایگزینی بر ویژگیهای الکتریکی، ساختاری و نوری آنها بررسی شده است. در مین پژوهش، جایگزینی SN/CC در موقعیت این جایگزینی SN/CC در مولکول SN/CC در موقعیت این جایگزینی مولی در ویژگیهای الکتریکی، ساختاری و نوری آنها بررسی شده است. در این پژوهش، جایگزینی SN/CC در موقعیت پل در مولکول C2112 دانوکاسه جدین که از 700 جدا شده است. هر می شود. محاسبات نظری این ساختارها با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام شده است.

۲- روش

M06- بهینه سازی و محاسبهی فرکانس ساختار مولکولهای C₂₂H₁₂ و حالتهای جایگزین شدهی BN/CC در سطح نظری -CAM روش -CAM روش -NLO در سطح نظری -CAM (مرج) و حالتهای عبواص نوری غیرخطی (NLO) روش -NLO در مطح نظری B3LYP به کار گرفته شد. عمق مولکولها از محاسبهی فاصلهی حلقهی مرکزی تا مرکز صفحهی فرضی که شامل تمام ۹ کربن مرزی می شود، محاسبه شده است. عمق ساختارهای بهینه شده، گشتاور دوقطبی و اولین فراقطبش پذیری در جدول ۱ گزارش شده است.

مولكول	عمق(Å)	μ(D)	$\cdot\beta(au)$	مولكول	عمق(Å)	μ(D)	$\cdot\beta(au)$
$C_{22}H_{12}$	•/810	1/882	۳٩/۱۸	-	-	-	-
1BN	•/٣١۴	1/194	874/10	1NB	•/947	۲/۷۳۲	771/77
2BN	•/••۴	•/••٧	۶۵/۷۷	2NB	۱/۱۵۰	۳/۰۶۷	226/28
3BN	•/••٣	1/400	۵۸/۹۶	3NB	۱/۳۰۶	۴/۵۰۴	۳۰۷/۸۶
4BN	•/•••	•/••۶	•/•74	4NB	1/4771	4/788	۳۹۳/ <i>۸</i> ۱

جدول ۱: عمق نانوکاسه، گشتاور دوقطبی(μ) و اولین فراقطبش پذیری(β۰)



۳– نتایج و بحث

در این پروژه، محاسبات DFT بر روی مولکول C22H12 برای بررسی تغییر ساختار، قطبیت و خصوصیات نوری غیرخطی انجام شد. به این منظور، گروه B-N به جای C=C در موقعیت پل قرار گرفت. این محاسبات برای هر دو جهت گیری و تعداد متفاوتی از این گروهها به کار رفت. ساختارهای بهینه شده در شکل ۱ آمده است.



شکل ۱: ساختار مولکولهای بررسی شده(اتمهای آبی رنگ N و اتمهای صورتی B هستند.)

۴– جمع بندی

جایگزینی BN/CC در مولکول C₂₂H₁₂ در جهت گیری BN با افزایش تعداد واحدهای BN، گشتاور دو قطبی و عمق مولکول کاهش می ابند؛ طوری که در 4BN به صفر می رسند. در جهت گیری NB، عمق و گشتاور دوقطبی با افزایش تعداد واحدهای NB افزایش می ابند. به نظر می رسد رابطهی معناداری بین این دو کمیت و اولین فراقطبش پذیری وجود دارد، چرا که روند کاهش و افزایش β۵ هم با این دو کمیت هم سو می باشد. نتایج این بررسی می تواند در کنترل عوامل مؤثر بر خواص نوری غیر خطی، دید گاه تازه ای ارائه دهد.

منابع و مراجع

[1] Wu, T. C., Hsin, H. J., Kuo, M. Y., Li, C. H., & Wu, Y. T. (2011). Synthesis and structural analysis of a highly curved buckybowl containing corannulene and sumanene fragments. Journal of the American Chemical Society, 133(41), 16319-16321.

[2] Biglari, Z., & Fallah, V. (2020). Influence of BN-orientation pattern at spoke location of corannulene on electro-optical properties and aromaticity. Journal of Molecular Structure, 1220, 128730.

[3] عبدالهی، س.، بیگلری، ز.، (۱۴۰۰). "بررسی تأثیر جهتگیری و تعداد واحدهای بورون- نیتروژن در موقعیت اسپوک نانوکاسه سومانن بر ویژگی آن". نانومقیاس, ۱۸(۱)، ۶۵-۶۸.

[4] Zou, Y., Zeng, W., Gopalakrishna, T. Y., Han, Y., Jiang, Q., & Wu, J. (2019). Dicyclopenta [4, 3, 2, 1-ghi: 4', 3', 2', 1'-pqr] perylene: a bowl-shaped fragment of fullerene C70 with global antiaromaticity. Journal of the American Chemical Society, 141(18), 7266-7270.



دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آیان ۱۴۰۳

مهرسا عدالت ٬ ، منصوره حسيني كوپائي ٬ ، نسيم بابک نژاد ٬

edmehrsa@gmail.com - دانشجو، مهندسی داروسازی، گروه مهندسی شیمی، دانشگاه نقش جهان اصفهان، Mansoorehosainy@yahoo.com ۲- استادیار ، بیوشیمی، گروه زیست شناسی، دانشگاه نقش جهان اصفهان، n.babaknejad@gmail.com ۳- استادیار ، بیوشیمی، گروه زیست شناسی، دانشگاه نقش جهان اصفهان، m.babaknejad@gmail.com

واژگان کلیدی: مولتیپل اسکلروزیس، ریزآرایه، ژن، تعامل پروتئین-پروتئین، داکینگ

۱– مقدمه

مولتیپل اسکلروزیس یک بیماری نورودژنراتیو خود ایمنی است که شیوع آن از سال ۱۹۹۰ در سراسر جهان افزایش یافته است. علائم ناشی از بیماری MS سبب ناتوانی فرد می شود و می تواند به طور قابل توجهی باعث درد بیماران گردد. MS یک بیماری تحلیل برنده غلاف میلین سلول های عصبی در سیستم عصبی مرکزی است[۱]. التهاب بافت های ماده سفید و خاکستری در CNS به دلیل انتشار سلولهای ایمنی کانونی و سیتوکینهای آنها علت اولیه آسیب در بیماری MS است. مطالعات نشان دادهاند که سلولهای کمکی T (همچنین به عنوان سلولهای CD4+ T نیز شناخته می شوند) نقش مهمی در شروع و پیشرفت MS دارند[۲]. لنفوسیتهایB و سیتوکینهای آنها از دیگر عوامل پاتوژنز MS هستند [۳]. در این مطالعه، چندین رویکرد بیوانفورماتیکی برای آشکار کردن نشانگرهای زیستی کاندید و مسیرهای اساسی مشترک در MS استفاده گردید. هدف از این پژوهش شناسایی اهداف دارویی ضد MS با مدلسازی و تحلیل ژنوم مقیاس متابولیکی بوده است. نتایج پژوهش حاضر نشان داد که در بروز بیماری MS دو دسته ژن با بیان افزایشی و بیان کاهشی در مقایسه با کنترل دخیل هستند. در مقایسه کتابخانه میکرواری بین گروه سالم و گروه تیمار ۱۱۹۰ (ژن مشتر ک وجود داشت. دادههای PPI برای یافتن پروتئین های مرکزی اندازه گیری شد ادغام شدند. یک شبکه PPI از DEGهای مشترک برای MS از طریق Cytoscape ایجاد گردید و از دو پلاگین cytoHubba و MCC برای Cytoscape استفاده شد تا به ترتیب به هاب پروتئینها و ساختارهای گروهی متراکم (خوشهها) از شبکه PPI بررسی شود. استفاده از نرم افزار Cytoscape ده ژن برتر (هاب ژنها)، از طریق تغییر دادن درجههای مرکزیت بینابینی و درجه گره تعیین گردید که این ژنها شامل KIF11، CDK1، CDK1، CDK3، BUB1، CDK3، KIF10، 7TK، DLGAP5، CDCA8، BUB1، SPAG5 ،TPX2 مىباشند. از بين اين ١٠ ژن برتر ٣ ژن شامل KIF11، CCNA2 و CDK1 با بيشترين امتياز و همچنين ساختار پروتئینی موجود به منظور مطالعات دارویی انتخاب گردیدند.

۲- روش

ساختار سه بعدی پروتئین KIF11 ، پروتئین CCNA2 و پروتئین www.rcsb.org CDK1 با فرمت pdb دانلود شدند. در این مطالعه با استفاده از نرم افزار PyRX عملیات داکینگ انجام شد. ابتدا لیگاند اصلی از قسمت Auto Dock/Make Macromolecule وارد نرم افزار شدند. سپس با کلیک راست بر روی رسپتور و گزینه Auto Dock/Make Macromolecule فرمت رسپتور به فرمت pdbqt تبدیل شد. در مرحله بعد به منظور وارد کردن داروها بر روی پنجره Make Ligand کلیک کرده و پپتیدها جداگانه به نرم افزار اضافه میشوند. سپس بر روی لیگاندها کلیک راست و با کلیک بر روی گزینه Minimise All، فرمت لیگاندها به په pdbqt تبدیل شدند. در مرحله بعدی با کلیک راست بر روی لیگاندها با کلیک بر روی گزینه Minimise All انرژی لیگاندها بهینه گردید. در قسمت انتخاب مولکول در نرم افزار با کمک کلید ctrl تمامی داروها و همچنین رسپتور انتخاب شد و گزینه forward کلیک شد. در نرم افزار پایرکس ابعاد جعبه گرید به صورت انتخاب اسیدهای آمینه درگیر در اتصال با استفاده از مقالات انجام گرفت. پس از تنظیم مرکز و ابعاد جعبه گرید در پایرکس مجدد با کلیک بر روی گزینه forward، نرم افزار، با توجه به جعبه گرید تنظیم شده غربالگری و داکینگ پپتیدها را آغاز کرد و جدولی از نتایج انرژیهای اتصال نمایش میدهد که بر اساس

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳

۳- بحث

در این مطالعه اتصال ۵ دارو به پروتئین KIF11 بررسی گردید. Filanesib به عنوان داروی کنترل در نظر گرفته شد. آمینواسیدهای قطبی درگیر در این برهمکنش آرژنین ۲۵۵، تیروزین۱۰۴، آسپارژین۲۹۸، میباشند که در عمدهی ترکیبات بدست آمده مشترک هستند. آمینو اسیدهای اسیدی حاضر در برهمکنش شامل اسید گلوتامات ۳۰۴ بودند. علاوه بر این برهمکنشها، پیوند هیدروژنی نیز وجود داشت. به طور کلی، ترکیب ۹۹۴۴۳۵۳۵ با انرژی اتصال (Kj/mol به) موثرترین برهمکنشها، پیوند هیدروژنی نیز وجود داشت. به طور کلی، ترکیب ۹۹۴۴۳۵۳۵ و داروی احتمالی Kl استفاده نمود. نتایج اتصال با KIF11 را نشان داد. و این ترکیب به عنوان یک مهار کننده بالقوه KIF11 و داروی احتمالی Kl استفاده نمود. نتایج داکینگ ۵ ترکیب برتر علیه CDK1 مورد بررسی قرار گرفت. Flavopiridol به عنوان داوری کنترل در نظر گرفته شد. آمینواسیدهای قطبی درگیر در این برهمکنش آسپارژین و تیروزین بودند که در عمدهی ترکیبات بدست آمده مشترک بودند. به طور کلی ترکیب ۸۹۴۸ با انرژی اتصال (CN× Kj/mol) موثرین اتصال با CDK را نشان داد. بنابراین، به عنوان مهار کننده CDX1 و داروی احتمالی Ms در نظر گرفته شود. در این مطالعه اتصال ۵ دارو به پروتئین CCNA2 نشان داده شده به طور کلی ترکیب (ژین، آرژنین، سرین بودند که در عمدهی ترکیبات بدست آمده مشترک بودند. برهمکنش آسپارژین، آرژنین، لیزین، سرین بودند که در عمدهی ترکیبات بدست آمده مشترک نشان داده شده برهمکنش شامل اسید آسپارتین، و گلوتان بودند که در عمدهی ترکیبات بدست آمده مشترک همید. این داد بنابراین، به عنوان مهار با آنزیم را نشان داد و این ترکیب به عنوان داروی کنترل در نظر گرفته شد. آمینواسیدهای قطبی درگیر در این با آنزیم را نشان داد و این ترکیب به عنوان مهارکننده CCN2 و داروی احتمالی Ms بانرژی اتصال (Kj/mol) موثرین اتصال



شکل ۱: نمای ۲ و ۳ بعدی از برهمکنش ترکیب ۹۹۴۴۳۵۳۵ با KIF11 بعد از انجام داکینگ





تعامل کمپلکس جدید ضدسرطان Pt (آمیل دیتیوکاربامات) با آلبومین سرم گاوی: مطالعه طیفسنجی و شبیهسازی مولکولی

زهرا عرب پورشيراز^{ا*}

زهرا عرب پورشیراز،دکترای تخصصی شیمی فیزیک،شیمی دانشکده شیمی دانشگاه پیام نور مرکز اصفهان

واژگان کلیدی: سینتیک، ترمودینامیک، برهمکنش، ضد سرطان، آلبومین سرم گاوی، داکینگ مولکولی.

۱– مقدمه

پروتئینها ترکیبات آلی نیتروژنداری هستند که توسط سلولهای زنده تولید میشوند و از فراوانترین ماکرومولکولهای زیستی موجود در سلول میباشند. در سطح مولکولی، کلیهی مکانیسمهای زیستی سلولها توسط پروتئینها انجام میشود. پروتئینها در ارتباط با یکدیگر به طور دقیق و بسیار کنترل شده وظایف خود را انجام میدهند. اساس مولکولی اغلب بیماریها میباشد. اگر کار پروتئینها از حالت طبیعی خارج شود میتوانند باعث بروز بیماریهای مختلف شوند. از جمله این بیماریها سرطان است. سیس پلاتین برای درمان سرطانهای انسانی مانند سرطان مثانه و تخمدان، سر و گردن و سرطان بیضه استفاده میشود. اما استفاده بالینی آن به دلیل برخی عوارض جانبی جدی محدود شده است. بنابراین میتوان از لیگاندهای دهنده S,S مانند دی تیوکارباماتها برای تهیه داروهای ضد سرطانی و کاهش برخی عوارض جانبی استفاده کرد. هدف از این پژوهش، مطالع مانند دی تیوکارباماتها برای تهیه داروهای ضد سرطانی و کاهش برخی عوارض جانبی استفاده کرد. هدف از این پژوهش، مطالع توانایی برهمکنش کمپلکسهای tp طراحی شده با فرمول [SOX](R.dtc)، که در آن typ بی بی پریدین و R.dt ، آمیل، ایزوپنتیل یا ترتامیل - dto از می بنتران و نه به می بوتیل - و ۲- متیل بوتان - دی تیوکاربامات، به ترتیب)، با آلبومین سر گاوی (BSA) با استفاده از تیتراسیون انتشار فلورسانس، طیفسنجی UV-Vi، و روشهای اتمال مولکولی می برامی.

۲- روش

در این پژوهش از روش های طیف سنجی مرئی فرابنفش و فلورسانس و داکینگ مولکولی استفاده شد و سنتیک شیمیایی، تعداد دسته جایگاه ها و نوع تعاونی، نوع مکانیسم خاموشی و محل دقیق اتصال کمپلکس به پروتیین مشخص شد.

۳- نتیجهگری

مقادیر منفی آنتالپی و آنتروپی نشان میدهد اتصال بین کمپلکس پلاتین با BSA از نوع پیوند هیدروژنی و واندروالس است. مقدار منفی انرژی آزاد گیبس به دست آمده از طریق تکنیک UV-Vis نیز یک برهمکنش خود به خودی را نشان داد. علاوه بر این، نتایج مربوط به تیتراسیون انتشار نشان داد که خاموش کردن فلورسانس پروتئین توسط کمپلکس پلاتین یک مکانیسم خاموش کننده استاتیک است. پارامترهای اتصال شامل ثابت خاموشی، تعداد جایگاه پیوندی و ثابت اتصال با معادله استرن-ولمر بدست آمد. نتایج نشان داد در برهمکنش سه کمپلکس با BSA تنها یک جایگاه پیوندی و جود دارد. نمودارهای اسکاچارد و هیل برای این کمپلکس مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج نشان داد نمودارهای اسکاچارد دارای شیب مثبت هستند بنابراین برهمکنش کمپلکس پلاتین با آلبومین سرم گاوی دارای تعاونی مثبت هستند. با استفاده از مدل سینتیک طیفسنجی، این برهمنکشمورد بررسی قرار گرفتند که نتایج سینتیک مرتبه دوم را نشان میدهد. نتایج داکینگ مولکولی، نشان داد جایگاه این کمپلکسها بر روی BSA جایگاه I زیر ناحیه IIA میباشد.

منابع و مراجع.

[1] Ho, YP., Au-Yeung, SC., To, KK.(2003). Platinum-based anticancer agents: Innovative design strategies and biological perspectives. *Med Res Rev*; 23(5),633-55.

[2] Mansouri-Torshizi, H.(2008). 2,2'- Bipyridinebutyldithiocarbamatoplatinum (II) and palladium (II) complexes: synthesis, characterization, cytotoxicity, and rich DNAbinding studies. *Bioorg Med Chem*, 16(21),9616-25.

[3] Shiekhzadeh, A., Sohrabi, N., Moghadam, M. E., & Oftadeh, M. (2020). Kinetic and thermodynamic investigation of Human Serum Albumin interaction with anticancer glycine derivative of platinum complex by using spectroscopic methods and molecular docking. applied biochemistry and biotechnology, 190(2), 506-528. ligand with HEN egg white lysozyme, *Phys. Chem. Res*, 1, 113-123.

[4] Hosseinzadeh, S., Eslami Moghadam, M., Sheshmani. Sh.,S. Shahvelayati, A.(2019). Some new anticancer platinum complexes of dithiocarbamate derivatives against human colorectal and pancreatic cell lines. *J biomol struct dyn BIOMOL*, 0739-1102.

[5] Islami.Moghaddam, M., Mansouri-Torshizi, H., Divsalar, A., and Saboury, A.A. (2014). The effects of oxalipalladium on the function and structure of liver catalase. *AMUJ*, 17(83): 40-49.

[6] Hadizadeh, Sh., Mazani, M., Najafzadeh, N., Mansouri-Torshizi, H., Pourheydar, B., Mirzanejad-Asl, H. (2015). The effect of new palladium (II) complexes of dithiocarbamate derivatives on the morphology and clonogenicity of liver cancer cell line. *Journal of Kashan University of Medical Sciences*, 6, 506-514.

[7] Shahraki S, Shiri F, Mansouri-Torshizi H, Shahraki J. Characterization of the interaction between a platinum (II) complex and human serum albumin: spectroscopic analysis and molecular docking. *J* iran chem soc, 2016,13(4):723-31.

[8] Eslami Moghadam M, Divsalar A, Abolhosseini Shahrnoy A, Saboury AA. (2016). Synthesis, cytotoxicity assessment, and interaction and docking of novel palladium (II) complexes of imidazole derivatives with human serum albumin. *J biomol struct dyn*, 34(8),1751-62.

[9] Shahraki S, Heydari A.(2018). Binding forces between a novel Schiff base palladium (II) complex and two carrier proteins: Human serum albumi and β -lactoglobulin. *J biomol struct dyn.*, 36(11),2807-21.

[10] Noorizadeh, S., Divsalar, A., Eslami-Moghaddam, M., Saboury, A. (2016). A structural study on the interaction of the anti-cancer compound of Platinum complex with human serum albumin. *Nova Biologica Reperta*, 2 (4), 250-259.



اتصال مولکولی و مطالعات طیف سنجی اتصال کمپلکسهای ضد سرطان پلاتین با البومین سرم گاوی

زهرا عرب پورشيراز^۱*

زهرا عرب پورشیراز،دکترای تخصصی شیمی فیزیک،شیمی دانشکده شیمی دانشگاه پیام نور مرکز اصفهان

واژگان کلیدی: سینتیک، ترمودینامیک، برهمکنش، ضد سرطان، آلبومین سرم گاوی، داکینگ مولکولی.

۱– مقدمه

پروتئینها ترکیبات آلی نیتروژنداری هستند که توسط سلولهای زنده تولید میشوند و از فراوانترین ماکرومولکولهای زیستی موجود در سلول میباشند. در سطح مولکولی، کلیهی مکانیسمهای زیستی سلولها توسط پروتئینها انجام میشود. پروتئینها در ارتباط با یکدیگر به طور دقیق و بسیار کنترل شده وظایف خود را انجام میدهند. اساس مولکولی اغلب بیماریها میباشد. اگر کار پروتئینها از حالت طبیعی خارج شود میتوانند باعث بروز بیماریهای مختلف شوند. از جمله این بیماریها سرطان است. سیس پلاتین برای درمان سرطانهای انسانی مانند سرطان مثانه و تخمدان، سر و گردن و سرطان بیضه استفاده میشود. اما استفاده بالینی آن به دلیل برخی عوارض جانبی جدی محدود شده است. بنابراین میتوان از لیگاندهای دهنده S,S مانند دی تیوکارباماتها برای تهیه داروهای ضد سرطانی و کاهش برخی عوارض جانبی استفاده کرد. هدف از این پژوهش، مطالع مانند دی تیوکارباماتها برای تهیه داروهای ضد سرطانی و کاهش برخی عوارض جانبی استفاده کرد. هدف از این پژوهش، مطالع توانایی برهمکنش کمپلکسهای tp طراحی شده با فرمول [SOX](R.dtc)، که در آن typ بی بی پریدین و R.dt ، آمیل، ایزوپنتیل یا ترتامیل - dto از می بنتران و نه به می بوتیل - و ۲- متیل بوتان - دی تیوکاربامات، به ترتیب)، با آلبومین سر گاوی (BSA) با استفاده از تیتراسیون انتشار فلورسانس، طیفسنجی UV-V، و روشهای اتمال مولکولی میباش.

۲- روش

در این پژوهش از روش های طیف سنجی مرئی فرابنفش و فلورسانس و داکینگ مولکولی استفاده شد و سنتیک شیمیایی، تعداد دسته جایگاه ها و نوع تعاونی، نوع مکانیسم خاموشی و محل دقیق اتصال کمپلکس به پروتیین مشخص شد.

۳- نتیجهگری

مقادیر منفی آنتالپی و آنتروپی نشان میدهد اتصال بین کمپلکس پلاتین با BSA از نوع پیوند هیدروژنی و واندروالس است. مقدار منفی انرژی آزاد گیبس به دست آمده از طریق تکنیک UV-Vis نیز یک برهمکنش خود به خودی را نشان داد. علاوه بر این، نتایج مربوط به تیتراسیون انتشار نشان داد که خاموش کردن فلورسانس پروتئین توسط کمپلکس پلاتین یک مکانیسم خاموش کننده استاتیک است. پارامترهای اتصال شامل ثابت خاموشی، تعداد جایگاه پیوندی و ثابت اتصال با معادله استرن-ولمر بدست آمد. نتایج نشان داد در برهمکنش سه کمپلکس با BSA تنها یک جایگاه پیوندی و وثبت مودارهای اسکاچارد و هیل برای این کمپلکس مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج نشان داد نمودارهای اسکاچارد دارای شیب مثبت هستند بنابراین برهمکنش کمپلکس پلاتین با آلبومین سرم گاوی دارای تعاونی مثبت هستند. با استفاده از مدل سینتیک طیفسنجی، این برهمنکشمورد بررسی قرار گرفتند که نتایج سینتیک مرتبه دوم را نشان میدهد. نتایج داکینگ مولکولی، نشان داد جایگاه این کمپلکسها بر روی BSA جایگاه I زیر ناحیه IIA میباشد.

منابع و مراجع.

[1] Ho, YP., Au-Yeung, SC., To, KK.(2003). Platinum-based anticancer agents: Innovative design strategies and biological perspectives. *Med Res Rev*; 23(5),633-55.

[2] Mansouri-Torshizi, H.(2008). 2,2'- Bipyridinebutyldithiocarbamatoplatinum (II) and palladium (II) complexes: synthesis, characterization, cytotoxicity, and rich DNAbinding studies. *Bioorg Med Chem*, 16(21),9616-25.

[3] Shiekhzadeh, A., Sohrabi, N., Moghadam, M. E., & Oftadeh, M. (2020). Kinetic and thermodynamic investigation of Human Serum Albumin interaction with anticancer glycine derivative of platinum complex by using spectroscopic methods and molecular docking. applied biochemistry and biotechnology, 190(2), 506-528. ligand with HEN egg white lysozyme, *Phys. Chem. Res*, 1, 113-123.

[4] Hosseinzadeh, S., Eslami Moghadam, M., Sheshmani. Sh.,S. Shahvelayati, A.(2019). Some new anticancer platinum complexes of dithiocarbamate derivatives against human colorectal and pancreatic cell lines. *J biomol struct dyn BIOMOL*, 0739-1102.

[5] Islami.Moghaddam, M., Mansouri-Torshizi, H., Divsalar, A., and Saboury, A.A. (2014). The effects of oxalipalladium on the function and structure of liver catalase. *AMUJ*, 17(83): 40-49.

[6] Hadizadeh, Sh., Mazani, M., Najafzadeh, N., Mansouri-Torshizi, H., Pourheydar, B., Mirzanejad-Asl, H. (2015). The effect of new palladium (II) complexes of dithiocarbamate derivatives on the morphology and clonogenicity of liver cancer cell line. *Journal of Kashan University of Medical Sciences*, 6, 506-514.

[7] Shahraki S, Shiri F, Mansouri-Torshizi H, Shahraki J. Characterization of the interaction between a platinum (II) complex and human serum albumin: spectroscopic analysis and molecular docking. *J* iran chem soc, 2016,13(4):723-31.

[8] Eslami Moghadam M, Divsalar A, Abolhosseini Shahrnoy A, Saboury AA. (2016). Synthesis, cytotoxicity assessment, and interaction and docking of novel palladium (II) complexes of imidazole derivatives with human serum albumin. *J biomol struct dyn*, 34(8),1751-62.

[9] Shahraki S, Heydari A.(2018). Binding forces between a novel Schiff base palladium (II) complex and two carrier proteins: Human serum albumi and β -lactoglobulin. *J biomol struct dyn*, 36(11),2807-21.

[10] Noorizadeh, S., Divsalar, A., Eslami-Moghaddam, M., Saboury, A. (2016). A structural study on the interaction of the anti-cancer compound of Platinum complex with human serum albumin. *Nova Biologica Reperta*, 2 (4), 250-259.



مطالعه محاسباتي بر روى مشتقات فلاوونوئيدها به عنوان بازدارنده خوردكي فلزات

فاطمه اکتفا ''* ، سید ایمان علوی دانا '

ا و*- نویسنده مسئول: استادیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی تهران (Fatemehektefa@yahoo.com) ۲- دانشجو کارشناسی، شیمی محض، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی تهران (Alaviiman6@gmail.com)

واژگان کلیدی: فلاوونوئید، بازدارنده خوردگی، DFT

۱– مقدمه

خوردگی فلزات یکی از مسائل و چالشهای امروزه در صنایع مختلف است که در سراسر جهان مورد توجه قرار گرفته است. ترکیبات آلی و معدنی متفاوتی در گیاهان مختلف وجود دارد که به این هدف مورد بررسی قرار گرفتهاند (۱و۲). یکی از این ترکیبات گیاهی مشتقات فلاوونوئیدها هستند که به تقریب در اکثر گیاهان یافت میشوند. این ترکیبات میتوانند حاوی تعداد فراوانی از اتمهای اکسیژن و نیتروژن باشند و از طرفی غالبا در آنها حلقههای آروماتیک یافت میشوند که خاصیت ضد خوردگی را بسیار بهبود می خشند. از مشتقات فلاوونوئیدها، میتوان به فلاوون (Flavone) و کوئرستین (Quercetin) اشاره کرد (۳و۴). در این پژوهش بر آنیم که اثر بازدارندگی این دو ترکیب را با روشهای مکانیک کوانتومی مورد بررسی قرار دهیم.

۲- روش

شکل ۱ ساختارهای بهینه شده هردو ترکیب فلاوون (Flavone) و کوئرستین (Quercetin) را نشان میدهد. خواص ضد خوردگی این ترکیبات براساس پارامترهای متفاوتی مانند سختی، نرمی، الکترونگاتیوی و همچنین اختلاف انرژی بین اوربیتال-های HOMO و LUMO مقایسه و ارزیابی میشود. روش M062X با مجموعه پایه 3116-6 برای محاسبات به کار برده شد.

۳- بحث و نتیجه گیری

شکل ۱ ساختارهای بهینه شده دو ترکیب را نشان میدهد.



شکل ۱. سختارهای مولکولی دو ترکیب سمت راست فلاوون و سمت چپ کوئرستین.

به صورت کلی Еномо به انرژی لازم برای از دست دادن الکترون اشاره دارد و هرچه میزان این انرژی بیشتر باشد تمایل مولکول برای دادن الکترون افزایش یافته و بنابراین جذب موثرتری را بر روی سطح فلز خواهد داشت (۵). بر اساس دادههای محاسباتی جدول ۱ میزان Еномо برای ترکیب کوئرستین بالاتر از فلاوون است بنابراین کوئرستین جذب بهتر و موثرتری را خواهد داشت. از طرفی دیگر ELUMO به تمایل ترکیب به جذب و پذیرش الکترون اشاره دارد. با توجه به این موضوع هرچه تمایل به جذب الكترون بيشتر باشد جذب برروى سطح فولاد موثرتر خواهد بود(۵). براين اساس نيز تركيب كوئرستين نسبت به فلاوون جذب موثرتری را خواهد داشت. همچنین براساس مطالعات قبلی(۵) هرچه ΔE کمتر باشد بازدارندگی ضد خوردگی افزایش می یابد، زیرا که انرژی آزاد کردن یک الکترون از آخرین اوربیتال اشغال شده کمتر خواهد شد. براساس جدول ۱، تر کیب کوئرستین که ΔE کمتری نسبت به فلاوون دارد درصد بازدارنگی بهتری را نشان خواهد داد. ابر الکترونی نرمتر میتواند به آسانی با محیط واکنش دهد و این واکنشها می توانند منجر به جذب بهتر و واکنش بهتر با سطح فلز شود (۳و۴). با توجه به بزرگی سختی و نرمی محاسبه شده، مشاهده می شود که کوئرستین دارای ابر الکترونی نرم تری است. همچنین لازم به ذکر است که هرچه الكترونكاتيوى افزايش يابد تمايل به واكنش با سطح فلز كاهش خواهد يافت و بنابراين جذب بر روى سطح فلز سخت تر شده و بازدارندگی کمتری را خواهد داشت (۴و۴). بنابراین موضوع، کوئرستین مجددا بازدارندگی بهتری را از خود نشان خواهد داد. شکل ۲ اوربیتالهای HOMO و LUMO دو ترکیب را نشان میدهد. با توجه به شکل ۲، مشاهده می شود که ابرالکترونی دهنده الکترون در کوئرستین بسیار نواحی بیشتری را داراست و این به خصوص به دلیل ساختار رزونانسی و اتمهای اکسیژن موجود در ساختار است که به آن خاصیت نوکلئوفیلی بیشتری را خواهد داد. بنابراین بر اساس نتایج بدست آمده کوئرستین ترکیب مناسب تر و موثرتری در بازدارنگی از سطح فلز خواهد بود.

الكترونگاتيويته (eV)	نرمی ^{۱−} (eV)	سختی (eV)	$(\mathbf{eV}) \Delta \mathbf{E}$	Еномо	Elumo	نام ترکیب
4.947	۰.۲۹۷	۳.۳۶۸	۶.۷۳۶	-۸.۰۱۵	-1.779	فلاوون
4.106	۸۳۳. ۰	۲.۹۵۶	۵.۹۱۲	-4.•82	-1.10.	كوئرستين

كوئرستين.	فلاوون و	دو مولکول	شده برای	ی محاسبه	جدول ۱. دادهها



شکل ۲. ساختارهای اوربیتال مولکولی HOMO و LUMO برای دو مولکول فلاوون و کوئرستین م**نابع و** مرا**جع**

[1] Veiga, M., Costa, E. M., Silva, S., & Pintado, M. (**2020**). Impact of plant extracts upon human health: A review. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, *60*(5), 873–886.



[2] Dehghani, A., Ghahremani, P., Mostafatabar, A. H., & Ramezanzadeh, B. (**2024**). Plant extracts: Probable alternatives for traditional inhibitors for controlling alloys corrosion against acidic media—A review. *Biomass Conversion and Biorefinery*, *14*(6), 7467–7486.

[3] de Souza Farias, S. A., da Costa, K. S., & Martins, J. B. L. (**2021**). Analysis of Conformational, Structural, Magnetic, and Electronic Properties Related to Antioxidant Activity: Revisiting Flavan, Anthocyanidin, Flavanone, Flavonol, Isoflavone, Flavone, and Flavan-3-ol. *ACS Omega*, *6*(13), 8908–8918.

[4] Deyab, M. A., Mohsen, Q., & Guo, L. (2022). Aesculus hippocastanum seeds extract as eco-friendly corrosion inhibitor for desalination plants: Experimental and theoretical studies. *Journal of Molecular Liquids*, 361, 119594.
[5] Gece, G. (2008). The use of quantum chemical methods in corrosion inhibitor studies. *Corrosion Science*, 50(11), 2981–2992.



طراحی محاسباتی نیمرساناهای آلی جهت کاربرد در سلولهای خورشیدی آلی

فاطمه فاضلى*'، اكبر اميدوار `

fatemefazeli1375@gmail.com المنه المفهان a.omidvar@chem.ui.ac.ir ۲- گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان ۲

واژگان کلیدی: نیمرسانا آلی، سلول خورشیدی، انتقال بار، نظریه تابعی چگالی.

۱– مقدمه

نیم رساناهای آلی به دلیل کاربردهای بالقوه در فناوریهای مختلف مانند دیودهای آلی ساطع کننده نور و فتوولتائیکهای آلی و سایر دستگاههای موجبر نوری، به طور ویژه مورد مطالعه قرار گرفتهاند. در میان تمام کاربردها، سلولهای خورشیدی آلی توجه زیادی را به خود جلب کردهاند و جایگزینهای مناسبی برای سلولهایخورشیدی مبتنی بر مواد معدنی هستند. انواع مختلفی از مولکولهای آلی به عنوان نیم رساناهای آلی استفاده شدهاند که از جمله میتوان به بسپارها و چارچوبهای پذیرنده-مختلفی از مولکولهای آلی به عنوان نیم رساناهای آلی استفاده شدهاند که از جمله میتوان به بسپارها و چارچوبهای پذیرنده-دهنده که توسط یک پل مزدوج π به یکدیگر متصل شدهاند، اشاره نمود. با این حال، علی رغم مزایای بسیاری مانند سبکی، انعطاف پذیری بالا، قابلیت تنظیم پذیری عالی، هزینه و آلودگی محیطی کم، بازده نیم رساناهای آلی نسبتاً کمتر از نیم رساناهای مبتنی بر مواد معدنی می باشد. در این مطالعه، بر اساس مولکول آلی کوچک که به تازگی سنتز شدهاست و در سلولهای خورشیدی آلی به کار گرفته شده، سه مولکول کوچک که میتوان مواد نیم رسانا آلی استفاده شورت نظری

۲- روش

تمامی محاسبات در این پژوهش بر اساس نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از نرم افزار گوسین (۰۹) انجام شده است. با مطالعه ساختار مرجع DPA-azo-A (شکل ۱) که پیش از این سنتز و کاربرد آن در سلول خورشیدی بررسی شده است[۱] و تلاش برای بازتولید برخی خواص تجربی (مانند گاف انرژی و طول موج بیشینه جذب) از مولکول مرجع، سطح محاسباتی مناسب مشخص شد. تمامی محاسبات مربوط به بهینه سازی ساختاری و همچنین انتقال بار در این پژوهش با استفاده از تابعی B3LYP به همراه مجموعهی پایه (d)+30 به انجام رسیده است.



۳- بحث و نتیجه گیری

در این پژوهش برای طراحی نیم رساناهای آلی جدید، با جایگزینی هر یک از واحدهای دهنده (D1)، پل پای (π1) و پذیرنده (A1) در ساختار مرجع در مجموع سه مولکول آلی جدید طراحی شد (شکل ۲).

جدول ۱ : شکاف انرژی (EH-L)، انرژی باز سازماندهی، انتگرال عبور، ثابت سرعت و تحرک بار حفره (علامت مثبت) و الکترون (علامت منفی) و بازده تبدیل توان در ساختار مرجع و مولکولهای طراحیشده.

Molecule	Egap(eV)	$\lambda^+(eV)$	t+(eV)	$k^{+}(s^{-1})$	μ^+ (cm ² /Vs)	λ ⁻ (eV)	$t^{-}(eV)$	$k^{-}(s^{-1})$	$\mu^{-}(\mathrm{cm}^{2}_{\square}/\mathrm{Vs})$	PCE%
DPA-azo-A	2.59	0.195	0.329	6.19×10^{14}	8.81×10-4	0.412	0.285	3.87×10 ¹³	1.42×10-4	27.01
D1-azo-A	2.18	0.201	0.317	5.31×10^{14}	1.05×10-3	0.223	0.288	3.38×10^{14}	4.45×10 ⁻³	41.98
DPA-п1-А	2.67	0.265	0.197	9.64×10^{13}	3.28×10 ⁻⁵	0.317	0.248	8.38×10^{13}	0	37.26
DPA-azo-			0.408	1.95×10^{15}	8.86×10-4	0.364	0.446	1.60×10^{14}	5.73×10-5	16.86
A1	2.28	0.138								



شکل ۲: ساختار بهینهشده مولکولهای آلی طراحی شده.

پس از بهینه سازی ساختارها، مقادیرگاف انرژی، انرژی بازسازماندهی، انتگرال عبور و ثابت سرعت ، تحرک بار الکترون و حفره برای ساختارهای دو پار و بازده تبدیل توان برای مولکول آلی مرجع و مولکولهای طراحی شده محاسبه و گزارش شده است (جدول ۱). پس از برخورد نور، زوج الکترون-حفره (اکسایتون) ایجاد شده در نیم رسانای یک سلول خور شیدی، به واسطهی حضور الکترودهای آند و کاتد از هم جدا می شوند. مطابق نظریه مارکوس، این حرکت الکترون و حفره به شکل پرش انجام می شود. حال با استفاده از کمیتی به نام ثابت سرعت عبور الکترون و حفره (اکسایتون) ایجاد شده در نیم رسانای یک سلول خور شیدی، به واسطهی حضور (جدول ۱). پس از برخورد نور، زوج الکترون – حفره (اکسایتون) ایجاد شده در نیم رسانای یک سلول خور شیدی، به واسطهی حضور الکترودهای آند و کاتد از هم جدا می شوند. مطابق نظریه مارکوس، این حرکت الکترون و حفره به شکل پرش انجام می شود. حال ([7]. به طوری که هر نیم رسانا با ثابت سرعت الکترون و حفره، کارایی یک نیم رسانا در انتقال سریع بار را می توان تخمین زد [7]. به طوری که هر نیم رسانا با ثابت سرعت الکترون و یا ثابت سرعت حفره بیشتر، عملکرد بهتری در یک سلول خور شیدی مقادیر بیشتر، عملکرد بهتری در یک سلول خور شیدی مقادیر بیشتر ثابت سرعت عبور حفره در مولکول طراحی شده 10 معدید منجر به تغییر ثابت سرعت عبور الکترون و حفره شده است. معادیر بیشتر ثابت سرعت عبور حفره در مولکول طراحی شده 10 مع می می را می توان به ⁺ ۸ کمتر و ⁺ ۲</sup> بیشتر در مقایسه مولکول مرجع نسبت داد. ثابت سرعت عبور الکترون در هر سه نیم رسانا طراحی شده نسبت به مولکول آلی مرجع افزایش یافته است و در نتیجه باعث بهبود عملکرد این نیم رساناها در تولید خواص فتوولتائیک بهتر در سلول خور شیدی حوای این مواد است و در نتیجه باعث بهبود عملکرد این نیم رساناها در تولید خواص فتوولتائیک بهتر در سالول خور شیدی می از مرجم موره این مرادی قرون و خوره یا بر مرجم و مولی ای مرجم این بیم رسانای حاوی واحد در بالاترین مقادیر تحرک بار رالکترون و حفره) بین لایه ی و بازده باین می را نیم رسانای حاوی واحد می این مرانای مرجم واحد خور شدن می مولدی و خور شدی می مربود و مربود و می و مربود و می مولی مرجم و موره یا بیم رمانای حاوی واحم می مولی و خور شدی و حمره و حفره) بین مربود و باین می مرد می می مردی و مروی و مرم می مرون و مرمی و و مرمی و

منابع و مراجع

[1] Chenab, K. K., & Meymian, M. R. Z. (2022). Replacing naphthalene with anthracene π -bridge improves efficiency of D- π -A triphenylamine dyes-based dye-sensitized solar cells. Sol Energy. 234, 9-20. [2] Yavuz, I., Martin, B. N., Park, J., & Houk, K. N. Theoretical study of the molecular ordering, paracrystallinity, and charge mobilities of oligomers in different crystalline phases. J. Am. Chem. Soc. 2015, 137(8), 2856-2866.

مطالعه نظری اثر لیگاند محوری هیستیدین و مشتقات آن بر اتصال CO به هِم

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳

فاطمهسادات فاطمىنسب^{١،*} رضا اميديان^{٢،*}، سعيد انديشه^٣

۱ و*- استادیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران، رایانامه: ftmfatemi61@gmail.com ۲- دانشیار، شیمی فیزیک، ، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، رایانامه: r.omidyan@sci.ac.ir ۳- دانشجو، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، رایانامه: sandisheh60@gmail.com

واژگان کلیدی: نظریه تابعی چگالی، لیگاند محوری، انرژی برهمکنش

۱– مقدمه

پروتئینهای هم گروهی از پروتئینها هستند که حاوی یک گروه هم هستند که از یک حلقه پروتوپورفیرین و یک اتم آهن تشکیل شده و نقش مهمی در فرآیندهای بیولوژیکی مختلف دارند. در سامانههای زیستی، بهویژه هموگلوبین و میوگلوبین، آهن در حالتهای اکسیداسیون متداول، آهن (II) و آهن (III)، یافت میشود یونهای آهن، با چهار نیتروژن صفحهی پورفیرینی هم، کمپلکس داده و لیگاند پنجم، در موقعیت محوری، هیستیدین (His93) است که پیوندشدن OC، 2O و NO را به هم تسهیل می کند (NF4، Reedy، آهن (II)، در این پژوهش، با استفاده از روش محاسباتی کوانتومی و با رویکرد TF4، اثر استخلافهای مختلف روی متیل ایمیدازول (بهعنوان مدل سادهتر His93) بر روی خواص پیوندشدن OC-200 مورد بررسی قرار داده مختلف روی متیل ایمیدازول (بهعنوان مدل سادهتر His93) بر روی خواص پیوندشدن OC-200 مورد بررسی قرار داده شدهاست. همچنین، برای کاهش هزینههای محاسباتی، از مدل ساده پورفیرین-آهن استفاده شدهاست. شایان ذکر است که در این مطالعه از اختصارات HM-104، P-104 به ترتیب برای سامانههای متیل ایمیدازول، ایمیدازول، پورفیرین و پورفیرین-آهن استفاده شدهاست. (۲۰۱۴ میدازول، پورفیرین و پورفیرین)

۲- روش محاسباتی

در این پژوهش از نرمافزار deMon2k، در چهارچوب نظریه تابعی چگالی کمکی (ADFT)، جهت بهینهسازی ساختاری سامانههای مورد نظر استفاده شد. در این کار، تابعی تبادلی-همبستگی OPBE (OPTX/PBE) و تابع پایه DZVP-GGA و ایم پایه OPBE (OPTX/PBE) به کار گرفته شدهاست. همچنین از دو تابع کمکی GEN-A2 برای اتمهای C و H و *GEN-A2 برای اتمهای درگیر در برهم کنش Fe (CO) O و (CO) C استفاده گردید. بهعلاوه اسپین در محاسبات به صورت لایه باز در نظر گرفته شد و به علت اهمیت برهم کنش وان دروالس بین CO و سامانه مورد نظر، تصحیح انرژی پراکندگی تجربی اعمال شد. علاوه بر این، برای تعیین اثر استخلافهای مختلف روی His93، بر میزان پیوند شدن CO به هم، مدلی از M محوری با استخلافهای مختلف حاوی گروههای الکترون دهنده (O) به آهن-پورفیرین (هم در فاز گازی و هم در فاز محلول)، از نرمافزار گوسین ۱۶، در سطح مراسی انرژی اتصال CO و ND به آهن-پورفیرین (هم در فاز گازی و هم در فاز محلول)، از نرمافزار گوسین ۱۶، در سطح



۳- بحث و نتیجه گیری

انرژی اتصال در سطح محاسباتی B3LYP/def2-TZVP هم در فاز گازی و هم در محیط حلال (58=3)، همراه با اصلاحات انرژی ZPE، میزان خطای برهمنهی تابع پایه (BSSE) و اثر پراکندگی محاسبه شدهاست. برای محاسبهی انرژی اتصال از رابطه (۱) استفاده گردید. انرژی اتصال در سطح محاسباتی B3LYP/def2-TZVP هم در فاز گازی و هم در محیط حلال (78=ع)، همراه با اصلاحات انرژی ZPE، میزان خطای برهمنهی تابع پایه (BSSE) و اثر پراکندگی محاسبه شدهاست. برای محاسبهی انرژی اتصال از رابطه (۱) استفاده گردید.

 $\Delta E_{b} = E_{[mIM-Fe}^{II}_{P-CO]} - (E_{[mIM-Fe}^{II}_{P]} + E_{[CO]})$

انرژیهای اتصال محاسبهشده، در جدول ۱ نشان داده شدهاست. در ابتدا، انرژی اتصال ترکیب بدون استخلاف محاسبهشده و سپس تأثیر استختلافهای الکتروندهنده و الکترونکشنده مورد مقایسه قرار گرفت. نتایج حاکی از تضعیف انرژی برهمکنش دو کمپلکس [mIM-OH-Fe^{II}P-CO] و [mIM-NH₂-Fe^{II}P-CO] به مقدار ۴/۸۷ و ۳/۰۳ است. بنابراین میتوان نتیجه گرفت که افزایش استخلافهای الکتروندهنده روی گروه mIM باعث افزایش خاصیت الکتروندهندگی این ترکیب روی آهن (II) شده و در نتیجه اتصال گروه CO به آهن را کاهش داده است. همچنین، بررسی جدول ۱ نشان میدهد که استخلافهای الکترونکشنده منجر به افزایش جزئی مقادیر مطلق انرژی اتصال در مقایسه با کمپلکس [mIM-Fe^{II}P-CO] شدهاند (یعنی تقویت جزئی). بنابراین میتوان نتیجه گرفت که افزایش گروههای الکترون کشنده روی گروه mIM، خاصیت الکتروندهندگی این گروه را به آهن (II) کاهش داده و در نتیجه باعث تقویت پیوندشدن CO به آهن (II) شده است.

BSSE	$\Delta_{ m ZPE}$	ΔE Dispersion	$\Delta E_{corr.}$ (gas)	ΔE_{corr} (solvent)
۱/۳۳	4/21	$-\Delta/YY$	-18/40	-13/95
۱/۳۳	۴/۷۱	-۵/۶۶	-19/17	-14/39
۱/۳۶	۴/۸۵	- % /• \	-19/88	- 1 ۵/۶A
١/١٩	۴/۶۸	-۵/Υ۵	-19/29	- <i>۱</i> ۷/۳۹
۱/۳۶	۴/۸۵	-λ/ • ۱	-19/•Y	- \ Y /۶۸
۱/۳۳	۴/۸۶	$-\Delta/YY$	$-1 m{m}/\Delta \lambda$	-17/71
۱/۳۴	۴/۹۹	-11/88	-9/47	-11/29
	BSSE 1/۳۳ 1/۳۶ 1/۳۶ 1/۳۶ 1/۳۶ 1/۳۶	BSSE Δ _{ZPE} \/٣٣ ۴/Υ \ \/٣٣ ۴/Υ \ \/٣۶ ۴/٨ Δ \/١٩ ۴/۶ Λ \/٣۶ ۴/٨ Δ \/٣۶ ۴/٨ Δ	BSSE Δ_{ZPE} $\Delta E_{Dispersion}$ $1/\Gamma T$ $F/Y 1$ $-\Delta/V Y$ $1/\Gamma T$ $F/Y 1$ $-\Delta/F F$ $1/\Gamma T$ $F/A \Delta$ $-F/\cdot 1$ $1/\Gamma F$ $F/A \Delta$ $-F/\cdot 1$ $1/19$ $F/F A$ $-\Delta/V \Delta$ $1/\Gamma F$ $F/A \Delta$ $-A/\cdot 1$ $1/\Gamma F$ $F/A \Phi$ $-A/\cdot 1$ $1/\Gamma F$ $F/P = -\Delta/V V$ $1/\Gamma F$ $F/P = -11/\Gamma T$	BSSE Δ_{ZPE} $\Delta E_{\text{Dispersion}}$ $\Delta E_{\text{corr.}}$ (gas) 1/٣٣ $F/Y1$ $-\Delta/YY$ $-1\lambda/F\Delta$ 1/٣٣ $F/Y1$ $-\Delta/SF$ $-19/1T$ 1/٣۶ $F/\Lambda\Delta$ $-F/\cdot 1$ $-19/\Lambda T$ 1/19 $F/S\Lambda$ $-\Delta/Y\Delta$ $-19/T9$ 1/٣۶ $F/\Lambda\Delta$ $-\Lambda/\cdot 1$ $-19/\tau 9$ 1/٣٢ F/AP $-\Delta/YY$ $-19/\tau 7$

جدول ۱: انرژی اتصال (kcal/mol) کمپلکسهای آهن (II)-پورفیرین در سطح محاسباتی B3LYP/def2-TZVP

۴-نتیجهگیری

در این مطالعه، پژوهش، تأثیر چندین استخلاف الکتروندهنده و الکترون کشنده بر روی لیگاند محوری (His93)، بر روی پیوندشدن لیگاند CO در موقعیت محوری (مقابل His93) مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاکی از این است که حضور استخلافهای مختلف بر روی حلقهی IM میتوانند منجر به تغییرات هندسی قابل توجهی در حبقهی پورفیرین شوند. بنابراین این امر ،باعث تغییر در توزیع بار الکتریکی و در نتیجه برهم کنشهای بین فلز مرکزی و لیگاند CO میشود. همچنین، حضور دو استخلاف الکتروندهندهی OH و NH2 باعث تضعیف برهم کنشهای بین فلز مرکزی و لیگاند CO میشود. همچنین، حضور دو استخلاف الکتروندهندهی OH و NH2 باعث تضعیف برهم کنش OD با هم و حضور استخلافهای -F، -F3، NO2 و NO2- میکند و بینشهای ارزشمندی را برای درک برهم کنشهای لیگاند با Mem هم را ارائه میدهد. بنابراین، با دستکاری میکند و بینشهای ارزشمندی را برای درک برهم کنشهای لیگاند با Mem هم را ارائه میدهد. بنابراین، با دستکاری



منابع و مراجع

[1] Reedy, C. J. & Gibney, B. R., (2004). Heme protein assemblies, Chemical Reviews Journal, 104, 617-650. [2] Fateminasab, F., Aarabi, M., de la Lande, A., & Omidyan, R. (2021). Theoretical insights on the effect of environments on binding of CO to the Heme: Ferrous and Ferric systems. Journal of Molecular Liquids, 344, 117961.



بررسی مکانیک کوانتومی انتقالهای الکترونی طیفهای UV-Vis در برخی مشتقات دارویی پیریمیدوکینولین: مطالعه اربیتالهای انتقال طبیعی

سارا فخرایی' `*، فاطمه مستقر ّ

۱ و *- دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور تهران، ایران fakhraee@pnu.ac.ir ۲-دانشجوی دکتری، شیمی آلی، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور تهران، ایران fmostaghar@gmail.com

واژگان كليدى: پريميدوكينولين، تابعي چگالى وابسته به زمان، TDDFT، انتقال هاى الكتروني، اربيتال انتقال طبيعي

۱– مقدمه

پریمیدوکینولینها هتروسیکلهای نیتروژندار هستند که کاربردهای درمانی بسیار زیادی در پزشکی و شیمی دارویی دارند. در میان پیریمیدوکینولینها، به طور خاص pyrimido[4,5-b]quinoline به علت فعالیتهای دارویی و ضدسرطانیاش توجه محققان بسیاری را در چند دهه گذشته به خود جلب کرده است. این ترکیبات بر روی آنزیم ها و گیرندههای مختلف سلولی تاثیر گذاشته و باعث توقف چرخه سلولیهای سرطانی میشوند. با توجه به اهمیت anoline[4,5-b]quinoline(4,5-b]quinoline مطالعات نظری در مورد خواص شیمیایی و ساختار الکترونی این ترکیبات در حالت پایه و برانگیخته دارای اهمیت بسیاری میباشد. در این تحقیق، ساختار الکترونی سه مشتق پیریمیدوکینولین، که با رویکرد شیمی سبز سنتز شدهاند [1]، مطالعه میباشد. در این تحقیق، ساختار الکترونی سه مشتق پیریمیدوکینولین، که با رویکرد شیمی سبز سنتز شدهاند [1]، مطالعه

۲- روش محاسبات

این تحقیق ساختار الکترونی سه مولکول مشتق شده از pyrimido[4,5-b]quinoline با بدنه مشترک (P a G a c 2 در شکل ۱). کلیه میکند (A و C در شکل ۱). کلیه میکند (A و C در شکل ۱). کلیه محاسبات در سطح محاسباتی **M062X/6-311++G توسط برنامه Gaussian16 [2] انجام گردید. روش تابعی چگالی وابسته به زمان (TDDFT) برای محاسبه طیفهای UV-Vis و انتقالهای الکترونی به کار گرفته شد.



شکل ۱: ساختارهای شیمیایی و هندسی بهینه شده مولکولهای A، A و C

جهت بررسی انتقالهای الکترونی و اربیتالهای درگیر در آنها، طیفهای جذبی UV-Vis و اربیتالهای انتقال طبیعی (NTO) مربوط به برانگیختگیهای ارتعاشی، دارای قدرت نوسان بیشتر از ۰/۱، محاسبه و در شکل ۲ نمایش داده شده است.

عهان ۲۹ و ۳۰ آبان ۲۰۴



شکل ۲: نمایش طیفهای UV-Vis و اربیتالهای حفره-ذره NTO مربوط به هر باند جذبی به همراه نمایش نوع انتقالها

۳-بحث و نتيجه گيري:

طیفهای جذبی شکل ۲ نشان میدهد که در این ساختارها انتقالهای الکترونی در ناحیه ماورابنغش اتفاق میافتد. مقایسه طیف سه ساختار A، B و C نشان میدهد که طول موجهای جذبی متناظر برای این ساختارها از A به C بطور واضح افزایشمی یابد که نشان از جابجایی قرمز (Red shift) بر اثر افزایش ۴ گروه متیل در B و همچنین یک استخلاف کلر در مولکول C میباشد. که نشان از جابجایی قرمز (Red shift) بر اثر افزایش ۴ گروه متیل در B و همچنین یک استخلاف کلر در مولکول C میباشد. بنابراین، در بین این سه ساختارها از A به Ω برای این ساختارها از جابجایی قرمز (Red shift) بر اثر افزایش ۴ گروه متیل در B و همچنین یک استخلاف کلر در مولکول C میباشد. بنابراین، در بین این سه ساختار، انتقالهای الکترونی در C با طول موج بیشتر و انرژی کمتری انجام میگردد. در بررسی زوج اربیتالهای حفره-ذره NTO در گیر در انتقالات الکترونی در C مشاهده میشود که در مولکولهای A و B انتقالها فقط از نوع * $\pi \to \pi$ بوده که از گروه فنیل به بدنه پیریمیدوکینولین انجام میگردد، در حالیکه با افزودن اتم کلر بر گروه فنیل در از نوع * $\pi \to \pi$ بوده که از گروه فنیل به بدنه پیریمیدوکینولین انجام میگردد، در حالیکه با افزودن اتم کلر بر گروه فنیل در مولکول C، انتقال الکترونی * $\pi \to \pi$ اضافه میشود. در مولکول C انتقال الکترونی * $\pi \to \pi$ از زوجهای غیر یوندی اتم کلر به بدنه پیریمیدوکینولین انجام میگردد، در مولکول C انتقال الکترونی * $\pi \to \pi$ از زوجهای غیرپیوندی اتم کلر به بدنه پیریمیدوکینولین انجام می گردد. در مولکول C انتقال الکترونی * $\pi \to \pi$ از زوجهای غیرپیوندی اتم کلر به بدنه پیریمیدوکینولین انجام می گردد. در مولکول C انتقال الکترونی * $\pi \to \pi$ از زوجهای مولکول C، انتقال الکترونی * $\pi \to \pi$ از زوجهای مولکول C، انتقال الکترونی * $\pi \to \pi$ از زوجهای مولکول C، از به بدنه پیریمیدوکینولین انجام می گردد. همچنین محاسبه مقادیر شکاف انرژی اربیتالهای مولکولی (MOs) مولکول C، ۲۹ را به ترتیب برای A، ورا A و C، ور بنفش می ورد. در ور نشان داد. کاهش شکاف انرژی از A به C نشان ده ده افزایش مولکولها در حضور نور فر از فرابنفش می ورد.

منابع و مراجع:

 Zare, A. & Dianat, M. (2021). A highly efficient and green approach for the synthesis of pyrimido[4,5b]quinolines using *N*,*N*-diethyl-*N*-sulfoethanaminium chloride. *Zeitschrift für Naturforschung B*, 76(2), 85-90.
 Gaussian 16, Revision C.01, Frisch, M. J.; Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.



مطالعه واکنش پذیری و حساسیت HOP-گرافن نسبت به گاز کربن دی اکسید

سيف اله جليلى''*، مريم فخرى'، آتنا شيبانى"، آتنا پاكزاديان ٔ

۱ و ۰۰ استاد تمام، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، علوم¬پایه و خواجه نصیرالدین طوسی،رایانامه sjalili@kntu.ac.ir ۲- کارشناسی ارشد ، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، ۳- کارشناسی ارشد ، فیتوشیمی، شیمی، پژوهشکده گیاهان و مواد اولیه دارویی و دانشگاه شهیدبهشتی، a.sheybani@mail.sbu.ac.ir

۴- پسادکتری، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، a.pakzadiyan@gmail.com

واژگان کلیدی: کربن دی اکسید، HOP-گرافن، نانوسنسورهای گازی

۱– مقدمه

امروزه به دلیل گسترش صنعت و رشد روزافزون حمل و نقل، آلودگی جوی به یک مشکل اساسی تبدیل شده است. (Rouhani امروزه به دلیل گلارش های تجربی و نظری متعددی نشان داده اند که میتوان حسگرهای مختلفی را برای جذب و تشخیص گازهای آلاینده استفاده کرد.(Shi et al., 2016) درمیان انواع حسگرها، حسگرهای گاز به دلیل کاربردشان در نظارت بر جو و گازهای آلاینده استفاده کرد.(Shi et al., 2016) درمیان انواع حسگرها، حسگرهای گاز به دلیل کاربردشان در نظارت بر جو و ملامت انسان برای اهداف پزشکی و شناسایی آلاینده ها و گازهای مضر مانند کربن دی اکسید مورد توجه قرار گرفته اند. All ملامت انسان برای اهداف پزشکی و شناسایی آلاینده ها و گازهای مضر مانند کربن دی اکسید مورد توجه قرار گرفته اند. سطح متوسط شکاف نواری نانوصفحات به ویژه صفحات کربنی اخیرا در ساخت دستگاه های نانو مورد توجه و بررسی قرار گرفته اند. سطح متوسط شکاف نواری نانوصفحات مبتنی بر کربن باعث شده است که از آن ها در آشکارسازها و حسگرها استفاده شود. (Yaday کرفته اند. و از این رو منوسط شکاف نواری نانوصفحات مبتنی بر کربن باعث شده است که از آن ها در آشکارسازها و حسگرها استفاده شود. (Yaday کرونه و ایز این رو منوار ی نانوصفحات مبتنی بر کربن باعث شده است که از آن ها در آشکارسازها و حسگرها استفاده شود. (Yaday کرونه و از این رو آن را با عنوان (et al., 2023) ماندال و همکارانش آلوتروپ جدید ۲بعدی متشکل از ۶ضلعی ۸،ضلعی و ۵ضلعی را پیش بینی کردند و از این رو آن را با عنوان (et al., 2024) ماندال و همکارانش آلوتروپ جدید ۲بعدی متشکل از ۶ضلعی ۸،ضلعی و ۵ضلعی را پیش بینی کردند و از این رو و دینامیک مولکولی تایند و همچنین این ساختار از نظر انرژی مطلوب ترازمان و میتوان با شبیه سازی های حالت فنونی آن را با عنوان (HOPG) میتوان را با منوان (HOPG) میتوان را با منول های را با میزشکی آن را میتوان با شبیه سازی های حالت فنونی آن را با عنوان را میتوان با شبیه مازی های حالت فنونی و دینامیک مولکولی تایید کرد و همچنین این ساختار از نظر انرژی مطلوب ترازموه ما به بررسی جذب گاز کربن دی ادهنده امکان وجود تجربی آن است.(HOPG) در انرژی مطلوب ترازمو ما مان وجود تجربی آن است.(HOPG) در ما ما به بررسی کردیم. این را میتوان را میتوان را میوان را با می را در در و و انخاب پذیری و ما ما با مرسی ما ما ما در را مروی ما ما به بررسی کردیم. این را

۲- روش

شبیه سازی جذب مولکول گاز کربن دی اکسید روی نانوصفحه HOP-گرافن در سایت های مختلف و بهینه سازی هندسه با استفاده از روش m062x و مجموعه پایه Gaussian 09 و با استفاده از نرم افزار Gaussian 09 انجام شد.



۳- بحث

یکی از جنبه های مهم تحلیل خواص الکترونی یک سیستم تعیین چگونگی توزیع اوربیتال های مرزی در یک ساختار است. اهمیت این موضوع در تشخیص مناطق واکنش پذیر و همچنین مطالعه تاثیر تزریق یک اتم در ویژگی های مربوط به الکترون در یک سیستم کربنی است. پس از جذب گاز تغییر در توزیع الکترونی سیستم مشاهده میشود.



۴- نتیجهگیری

با استفاده از روش m062x و مجموعه پایه HOP(d,p) و 5-3 جذب مولکول گاز کربن دی اکسید برروی نانوصفحه HOP-گرافن بررسی شد.انرژی های جذب و انرژی های HOMO و LUMO و گاف انرژی (band gap) قبل و بعد از جذب مقایسه شد. انرژی جذب یک سیستم نشان دهنده میزان جذب یک مولکول گاز توسط یک جاذب است و هرچقدر مقدار منفی آن بیشتر باشد، جذب قوی تر است.بنابر نتایج به دست آمده HOP-گرافن میتواند به عنوان یک کاندید امیدوارکننده برای سنجش گاز کربن دی اکسید استفاده شود.

منابع و مراجع

- [1] Ali, Z. M., Murshed, M. N., El Sayed, M. E., Samir, A., Alsharabi, R. M., & Farea, M. (2023). A new fabrication strategy of Ag2O doped PANI as a highly stable and room temperature operable carbon monoxide gas sensor. *Optical Materials*, 144, 114324.
- [2] Mandal, B., Sarkar, S., Pramanik, A., & Sarkar, P. (2013). Theoretical prediction of a new two-dimensional carbon allotrope and NDR behaviour of its one-dimensional derivatives. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(48), 21001-21006.
- [3] Rouhani, M., Kord, S., & Mirjafary, Z. (2020). Ga-doped phagraphene as a superior media for sensing of carbon monoxide: A detailed theoretical investigation. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 116, 113710.
- [4] Shi, C., Chen, Y., Liu, H., Cui, G., Ju, L., & Chen, L. (2016). Adsorption and gas-sensing characteristics of a stoichiometric α-Fe 2 O 3 (0 0 1) nano thin film for carbon dioxide and carbon monoxide with and without pre-adsorbed O 2. *RSC advances*, 6(5), 3514-3525.



- [5] Wu, C. (2017). Inorganic two-dimensional nanomaterials: fundamental understanding, characterizations and energy applications. Royal Society of Chemistry.
- [6] Yadav, A., Mustafa, M. A., Suleman, A. D., Al-Shami, K. R., Mahdi, M. S., Al-Tameemi, A. R., Ramadan, M. F., Yousif, Z. S., Joui, R., & Khuder, S. A. (2024). Phographene as a new carbon allotrope for adsorption and detection of SO2, AsH3, NO2, CF3H, and CO2 air pollutant gaseous species. *Journal of Molecular Modeling*, 30(8), 297.



کاربرد تئوری تابع چگالی (DFT) برای بررسی ویژگی ریزساختاری سیستم های اتیلن گلیکول دی استات + ۱–الکل ها (C3-C8) از دیدگاه تجربی

معصومه فراهاني فروزي (*، حسين ايلوخاني ، خاطره خانلرزاده ".

۱. دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک،شیمی و علوم نفت، دانشگاه بوعلی سینا (Masumehfaarahani@gmail.com) ۲- استاد ، شیمی فیزیک ، شیمی فیزیک ،شیمی و علوم نفت، دانشگاه بوعلی سینا، (iloukhani@basu.ac.ir) ۳- دکتری تخصصی، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک ،شیمی و علوم نفت، دانشگاه بوعلی (khaterehkhanlarzadeh@gmail.com)

واژگان كليدى: DFT، اتيلن گليكول دى استات، حجم مولى فزونى، معادله ردليچ كيستر، ۱- الكل ها).

۱– مقدمه

تئوری تابع چگالی برای مطالعه ساختار مولکولی ترکیبات و پیش بینی واکنش پذیری آن ها استفاده می شود (Medimagh) (2023. از سوی دیگر، ترمودینامیک خواص فزونی مانند حجم مولی فزونی بینش هایی را در مورد رفتار غیر ایده آل ارائه می دهد (2005 Wankhede). به منظور بررسی برهم کنش های بین مولکولی در مخلوط های دوتایی اتیلن گلیکول دی استات با ۱-الکل ها (C3-C8) در دمای ۲۹۸/۱۵کلوین، حجم مولی افزونی با استفاده از چگالی تجربی محاسبه شد. در این پژوهش، ساختار مونومرهای اتیلن گلیکول دی استات و ۱- الکل ها با استفاده از تئوری تابع چگالی با سطح B97XD/cc-PVDZ وبا استفاده از نرم افزار گوسین ۰۹ مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

۲- روش

چگالی مواد خالص مورد استفاده در این پژوهش با مقادیر موجود در مراجع مقایسه شد، که هماهنگی خوبی بین مقادیر اندازه گیری شده و مقادیر موجود در مراجع مشاهده شده است. برای ساختن کسرهای مولی، از ترازوی دیجیتال Metlerمدل AB204N با دقت ۰/۰۰۰۱ گرم، استفاده شده است. برای اندازه گیری چگالی از دستگاه چگالی سنج آنتون پار مدل DSA 5000 استفاده شده است. برای محاسبات DFT در مرحله اول تمامی برهم کنشهای بین اتیلن گلیکول دی استات با مولکولهای ۱- الکل ها با استفاده از نتایج پتانسیل الکترواستاتیک مولکولی در نظر گرفته شد و سپس ساختار انتخابی بدون فرکانس فرضی توسط نرم افزار گوسین ۰۹ طراحی شد و در سطح B97XD/cc-PVDZ نظریه TFT بهینه شده است.

۳- بحث ونتيجه گيری

حجم مولی فزونی سیستمهای دوتایی، اتیلن گلیکول دی استات با ۱-آلکانول ها در دمای ۲۹۸/۱۵ K با استفاده از دادههای تجربی چگالی در تمام محدوده کسر مولی محاسبه و مورد بررسی قرار گرفت و نتایج با استفاده از رابطه وابسته به دمای ردلیچ کیستر همبسته شده است (Redlich 1948)، مقادیر حجم مولی فزونی انحراف مثبت از حالت ایدهآل را نشان میدهد که بدان معنی است که اضافه کردن ۱-آلکانولها به اتیلن گلیکول دی استات باعث افزایش حجم سیستم میشود که نشان دهنده برهمکنش بین مولکولی ضعیف در سیستم است و همچنین قابلیت مدل گوسین در تفسیر دادههای حجمی مولی فزونی بررسی شدکه نشان داد پیوند بین اتیلن گلیکول دی استات و ۱-الکلها واندروالس است ونیز مثبت بودن انرژی آزاد گیبس نشان میدهد فرآیند اختلاط غیر خودبه خودی است، که مثبت بودن حجم مولی فزونی را تایید می کند.

جدول ۱ : مقادیر چگالی، ρ، حجم مولی فزونی، V^E، انرژی جذب، Eads، انرژی برهمکنش، Eint و انرژی آزاد گیبس، ΔG اتیلن گلیکول دی استات و ۱- الکل ها در دمای ۲۹۸.۱۵ درجه کلوین.

$\begin{array}{c} \Delta G \\ \text{(kcal/mol)} \end{array}$	E _{int} (kcal/mol)	E _{ads} (kcal/mol)	V _{m,Max} (Cm ³ .mol ⁻¹)	ρ_{Max} (g/cm ³)	سیستم دو جزئی
٨/۶٧	-17/48	-11/47	۰/۵۲۱	1/•٨•۴٢	اتیلن گلیکول دی استات + پروپانول
۱۰/۵۸	-1٣/٧1	-17/71	•/847	۱/۰۷۵۳	اتیلن گلیکول دی استات + بوتانول
١٣/۶٨	-13/44	-17/74	•/٨٨٢	١/•٧١١٨	اتیلن گلیکول دی استات + پنتانول
13/14	-11/79	-11/47	۱/۱۰۱	۱/•۶٨	اتیلن گلیکول دی استات + هگزانول
٣/۶٨	-17/77	-11/98	1/194	1/0801	اتیلن گلیکول دی استات + هپتانول
۳/۲۵	-17/77	-11/83	1/384	1/0814	اتیلن گلیکول دی استات + اکتانول



شکل ۱: نمودار حجم مولی فزونی، برای سیستم¬های دوجزئی (△) {اتیلن گلیکول دی استات (x)+ پروپانول (x2) }، (●) { اتیلن گلیکول دی استات (x)+ بوتانول (x2) }، (♦) { اتیلن گلیکول دی استات (x)+ پنتانول (x2) }، (■) { اتیلن گلیکول دی استات (x)+ هگزانول (x2) }، (*) { اتیلن گلیکول دی استات (x)+ هپتانول (x2) } و (▲) { اتیلن گلیکول دی استات (x)+ اوکتانول (x2) } در دمای15/298 لکنقاط نشان¬دهنده¬ی مقادیر تجربی و خطوط بیان¬کننده¬ی مقادیر بیان¬شده توسط معادله¬ی ردلیچ – کیستر است.

منابع ومراجع

[1] Medimagh, M., Mleh, C. B., Issaoui, N., Kazachenko, A. S., Roisnel, T., Al-Dossary, O. M., ... & Bousiakoug, L. G. (2023). DFT and molecular docking study of the effect of a green solvent (water and DMSO) on the structure, MEP, and FMOs of the 1-ethylpiperazine-1, 4-diium bis (hydrogenoxalate) compound. *Journal of Molecular Liquids*, *369*, 120851.



[2] Wankhede, N. N., Lande, M. K., & Arbad, B. R. (2005). Excess molar volumes and viscosity deviations of binary mixtures of 2, 4, 6-trimethyl-1, 3, 5-trioxane+ ethanol, 1-propanol, and 1-butanol at (298.15, 303.15, and 308.15) K. *Journal of Chemical & Engineering Data*, *50*(3), 969-972.

[3] Redlich, O., & Kister, A. T. (1948). Algebraic representation of thermodynamic properties and the classification of solutions. *Industrial & Engineering Chemistry*, 40(2), 345-348.



برهمکنشهای مولکولی بین ترکیبهای گوگرددارمطلوب بامایعات یونی جهت گوگردزدایی درصنایع پالایش نفتی:مطالعه DFT

ژیلا فرج زاده^۱، محسن افتاده^{۲*}، نسرین سهرابی^۳

farajzadehjila@gmail.com، دانشگاه پیام نور اصفهان، M_oftadeh@pnu.ac.ir ها. استاد، شیمی کوانتومی، گروه شیمی، دانشگاه پیام نور اصفهان، ۳.دانشیار، بیوشیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشگاه پیام نور اصفهان، nsohrabi99@pnu.ac.ir

واژگان كليدى: مايعات يونى, نفت خام , تركيبات گوگردى, حالت گذار, پيوندهاى بين مولكولى، پيوند هيدروژنى

۱. مقدمه:

ترکیبهای گوگردی موجود در ذخایر خوراک پتروشیمی و سوختهای مایع یکی ازمهمترین منابع آلایندههای گوگرد هستند. اکسیاسیدهای گوگرد، بسیاری از اثرهای محیطی نامطلوب درهنگام احتراق سوخت تولید میکنند. به طوری که این نگرانیها در سراسر جهان ایجاد شده است. [۱] علاوه بر این، ترکیبات گوگرد در مورد خوردگی قسمتهایی از موتورهای احتراق داخلی و پالایشگاهها وهمچنین کاتالیزورهای سمی وغیر فعال شده مورد استفاده در پالایشگاههای نفتخام، اتومبیل وسلولهای سوختی اهمیت دارند. [۲] چشمانداز گوگردزدایی از سوخت ازنکات محیطی وصنعتی ضروری است.[۳، ۴، ۵] نمکزدایی استخراجی (EDS)یکی از امیدوارکنندهترین روش ها برای داشتن محتوای گوگرد استاندارد است. از بین اکثر استخراجکنندگان، مایعهایی ونی (ILs) به دلیل داشتن خواص مطلوب و سازگار با محیط مناسب تر هستند. بنابراین، حذف ترکیبهای گوگردی در صنعت و از دیدگاههای زیست محیطی لازم است. [۶، ۷، ۸] مقررات جدی برای کاهش میزان گوگرد در قانون در اکثر نقاط جهان وضع شده است. ازسال ۲۰۱۰ به بعد، دربسیاری از کشورها به حدود ۱۰ ppm در سوخت میرسد. [۴، ۸] اگر چه فرآیند هيدرودولفوريزاسيون (HDS)، كه توسط پالايشگاهها به كار ميرود، خوب و مناسب است. فنآوري معمولي، براي تركيبات بنزوتیوفنیک موثرنیست [۹، ۱۰] و نیاز به شرایط با کاتالیزور فعال تر برای غلبه بر این مشکل دارد. این امر منجر به افزایش هزینهها میشود [۹٬۱۱] ترکیبهای گوگردی در سوخت، مانند بنزین و سوخت دیزل باعث انتشار SO_X در طول احتراق، افت راندمان احتراق، غیرفعال کردن کاتالیزور و افزایش انتشار CO وذرات می شود .بنابراین، تحقیقات جدی برای ارتقاء کیفیت گوگردزدایی موجود انجام شده است. فن آوری هایی مانند استخراج، اکسیداسیون، جذب و استخراج-کاهش، به عنوان یک روش خوب، ارزان، فناوری سریع وکارآمد، روشهایی بالقوه برای تولید سوخت مایع با گوگرد استاندارد بدون تغییرکیفیت محتوای سوخت هستند. [۲،۸] روش HDS برای از بین بردن گوگرد آلیفاتیک مانند تیول ،تیواترو… موثر است اما برای از بین بردن ترکیبهای گوگردی هتروسیکلیک مانند تیوفن، بنزوتیوفن، دی بنزوتیوفن و مشتقات آنها به دلیل عدم جذب در سطح کاتالیزور موثر نیست. برای کاهش محتوای گوگرد به مقدار کمتر با استفاده از HDS شرایط سختتری مانند درجه حرارت بالاتر، فشار بالاتر نیاز است. گوگردزدایی با EDS یک روش مطلوب است. این روش در شرایط ساده عمل میکند، [۱۳، ۱۳] ساختار شیمیایی ترکیبات موجود در سوختها و روغنهای سوختی و ترکیبات گوگردی استخراج شده به عنوان مواد اولیه قابل استفاده مجدد نیستند. حلالهای حلقوی، مانند ایمیدازولدینون، پیرایمیدینون و دی متیل سولفوکساید برای EDS آزمایش شده اند. ماهیت



فرار چنین حلالهای مولکولی همراه با تعداد محدودی از عصاره گیری مناسب همراه است، پس از کاربرد طبیعی EDS در صنایع به دلیل از بین رفتن خواص حلال و استخراج دشوار خودداری می شود.[۱۴]درسالهایاخیر،مایعهاییونی (ILs) توجه بیشتری را به خود جلب کردهاند زیرا میتوان از آنها به عنوان جایگزینهای مناسب برای حلالهای آلی، قابل اشتعال وسمی در فرآیندهای مختلف [۱۶، ۱۵] از جمله سمزدایی استخراج (EDS) استفاده کرد. مایع یونی N-بوتیل پیریدینیم تترا فلوروبورات در اینجا در نظر گرفته شده است. ترکیبهای گوگردی تیوفن, بنزوتیوفن, دیبنزوتیوفن و ۴و۶-دیبنزوتیوفن مورد بررسی قرار گرفتهاند.

۲.روش

محاسبات تابع چگال با استفاده از برنامه گوسین ۰۹ انجام شد. در اینجا ابتدا ساختار کلیه ترکیبهای گوگردی و مایعات یونی در برنامه گوسین ۰۹ با سطح تئوری DFT و تابع پایه G++16-6 بهینه شد. بهینه سازی ساختار ترکیبهای گوگردی و مخلوط آنها با مایعات یونی هم در فاز گاز و هم در فاز محلول انجام شده است. این سطح از تئوری برای تخمین دادههای ترموشیمیایی توصیه می شود. تمام مواد در سطح حداقل انرژی و در حالت فرکانسهای مثبت قرار داشتند. برای بدست آوردن نوع و تعداد پیوندها در هر ترکیب و مخلوط مایع یونی و ترکیب گوگردی از بسته نرم افزاری OST2 استفاده شده است. برای بدست آوردن حالت گذار در هر مخلوط از ترکیب گوگردی و مایع یونی از روش QST2 استفاده شده است. و فرکانسهای ارتعاشی هارمونیک، انرژیهای نقطه صفر و انرژی آزاد گیپس از محاسبات فرکانس بدست آمد.ترکیبات مورد بحث در این مقاله در شکل ۱ آمده است.



N, [C4Py][BF4], IL–بوتيل پيريدينيوم تترافلورو بورات



۴،۶, C₁₂H₈S, T3 - دىمتىل بنزوتيوفن ۴،۶, C₁₀H₁₀S, T4

شکل۱. ساختار ترکیبهای گوگردی حلقوی و مایع یونی

۳.بحث

پس از بهینهسازی کاتیون و آنیون در مایع یونی، بهینهسازی مخلوط ترکیب گوگردی و مایع یونی هم در فاز گاز و مایع بررسی شد. نتایج این بهینهسازی در جدول ۱ آورده شده است. شکل بدست آمده برای پتانسیل الکترواستاتیکی ترکیبات مشخص شده است. شکل۲ این پتانسیل الکتریکی را در تیوفن و مایع یونی نشان می دهد.



استفاده از روش(DFT/B3LYP/6-31G++(d,p	گوگردی با	رای بهینهسازی ترکیبهای	جدول۱. دادههای بدست آمده بر
--------------------------------------	-----------	------------------------	-----------------------------

Compound	Energy (a.u.)	μ (D)	RMS
T1	-553.0733	0.5187	0.00019437
T2	-706.7577	0.6425	0.00001348
Т3	-860.4444	0.7803	0.00000706
T4	-785.4129	1.0403	0.00000450

ارزیابی انرژی متقابل[BF4][C4Py] با هر ترکیب گوگردی میتواند به ارتباط مجموعهها کمک کند. به توضیح کاراییهای مختلف استخراج برای ترکیبات گوگردی حلقوی کمک میکند.جدول۲ این انرژیها را نشان میدهد.

جدول۲. انرژی برهمکنش بین مایع یونی و ترکیبهای گوگردی									
Compound	$E_{\rm IL+sulfur\ compound}$	$E_{ ext{ compound}}$	E_{IL} -sulfur compound	ΔΕ					
T1	-1383.910	-553.0732	-1383.9051	0.0049					
T2	-1537.5968	-706.7577	-1537.5896	0.0079					
Т3	-1691.2825	-860.4443	-1691.2762	0.0063					
T4	-1616.2531	-785.4129	-1616.2448	0.0083					
IL	-	-830.8319	-	-					
با توجه به دادههای بدست آمده از محاسبات AMI2000، تجزیه و تحلیل پتانسیل الکتروستاتیک انجام شد که کاتیون پتانسیل الکتروستاتیک به شدت مثبت و آنیون پتانسیل الکتروستاتیک به شدت منفی دارد. تجزیه و تحلیل اتمها در مولکولها (AIM) برای بررسی خواص توپولوژیکی برهمکنشها انجام شد. چگالی الکترونی کل(p(r)و لاپلاسیندر نقطه بحرانی پیوند (BCP) برای نشان دادن ویژگیهای پیوندهای شیمیایی مفید هستند. نتایج نشان می دهد که C4P43-[BF4][BF4] دارای ۹ نقطه بحرانی پیوند (BCP) است در حالیکه [C4Py] با ترکیبات C4P468، C8H6S ، در 12H88، C8H63 به ترتیب دارای ۸، ۹ نقطه بحرانی پیوند (BCP) است در اینجا هم هرچه تعداد شاخههای روی حلقه بیشتر باشد احتمال برهمکنش حلقه با اجزاء IL بیشتر می شود. (جدول ۳)

دانسکاه اصفیان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳



جدول ٣. لا پلاسين و دانسيته الكتروني بدست آمده از AIM2000 از مجموعه مايع يوني و تيوفن

Bond	V	Н	Т	L	CD	Λ_1	$\hat{\Lambda}_2$	λ 3
S-H ₁₃	0.00090	-0.00047	0.00138	-0.00186	0.00232	-0.00142	-0.00133	0.01020
F_{28} - H_{24}	0.01320	-0.00186	0.01571	-0.01757	0.01865	-0.02158	-0.02015	0.11205
F_{28} - H_{15}	0.00666	-0.00011	0.00783	-0.00900	0.00983	-0.00952	-0.00862	0.05416
F_{28} - H_{17}	0.00164	-0.00074	0.00239	-0.00313	0.00293	-0.00215	-0.00157	0.01628
F29-H38	0.00626	-0.00129	0.00755	-0.00885	0.00975	-0.01040	-0.01019	0.05600
F_{27} - H_{24}	0.00833	-0.00192	0.01026	-0.01219	0.01124	-0.00901	-0.00196	0.05974
F26-H38	0.00376	-0.00105	0.00481	-0.00586	0.00566	-0.00500	-0.00287	0.03136
F_{26} - H_{13}	0.00741	-0.00110	0.00852	-0.00962	0.00110	-0.00882	-0.00451	0.05647
F_{26} - C_1	0.00777	-0.00150	0.00928	-0.01078	0.01067	-0.00802	-0.00373	-0.05242

تشکیل کمپلکس بینمایع یونی و ترکیب گوگردی، توزیع مجدد چگالی الکترون را ایجاد می کند. برای در ک توزیع مجدد الکترون ناشی از برهمکنش بین مایع یونی و ترکیبات گوگردی, نقشههای توزیع چگالی الکترون را داریم. تفاوت چگالی الکترون در ناحیه برهمکنش بین IL و ترکیب گوگردی قرار دارد. نتایج نشان می دهد که چگالی الکترونی اتم S افزایش یافته است که آن به دلیل انتقال الکترون از اتم های کربن متصل به S ، به ان است. در آنیون موجود در IL چگالی الکترون بر روی B کاهش یافته است. به این دلیل که الکترون از اتم های کربن متصل به S ، به ان است. در آنیون موجود در IL چگالی الکترون بر روی B کاهش یافته است. به این دلیل که الکترون به اتم های F منتقل شده است. (شکل ۳) برای بدست آوردن فعل و افعالات دهنده – پذیرنده بین [BF4] با ترکیبات گوگردی مورد مطالعه, تجزیه و تحلیل NBO انجام شد. بیشترین انرژیهای بین الکترونها مربوط به پیوند B-F است. همپوشانی اوربیتالها در نوع پیوندی حدود ۱۹۹/ است اما در ضد پیوندیها بسیار کوچک است.(جدول^۹)



Donor NBO(i)	Accepter NBO(j)	E ⁽²⁾	Ej-Ei	F(j,j)
		(kcal/mol)		
LP*B25	RY*B25	21.57	12.03	1.028
LP(4) F26	LP*(2)B25	97.88	0.85	0.263
LP(4) F26	LP*(3)B25	137.10	0.85	0.311
LP(4) F26	LP*(4)B25	90.71	0.90	0.260
LP(4) F27	LP*(1)B25	85.83	0.86	0.249
LP(4) F27	LP*(2)B25	161.50	0.86	0.338
LP F27	LP*(4)B25	133.32	0.9	0.315
LP(4) F 28	LP*(3)B25	155.56	0.84	0.330
LP(4) F 28	LP*(4)B25	106.53	0.89	0.280
LP(4) F 29	LP*(1)B25	213.56	0.88	0.394
LP(4) F 29	LP*(4)B25	196.77	0.92	0.384

جدول ۴. نتایج NBO برای برهمکنش تیوفن و مایع یونی

با توجه به محاسبات انجام شده در گوسین ۰۹ در سطح DFT با تابع پایه (d,p)++G311-G++ برای مایع یونی با ترکیبات گوگردی یک حالت TS بدست آمد. در جدول ۵ انرژی های بدست آمده آورده شده است. با توجه به مقادیر انرژی بدست آمده تفاوت انرژی حالتگذار و محصول بسیار کم است.در نمودار ۱ قابل مشاهده است. همچنین شکلهای بدست آمده از نرم افزارAIM2000، هم شبیه بودن ساختار حالت گذار به محصول را نشان میدهد.



-							
	Compound	Eele	E_{ele}^{ZPE}	G	ΔE^{ZPE}_{ele}	ΔG	
	T1	-553.0732	-553.0068	-553.0241			
	T2	-706.7577	-706.6441	-706.6652			
	T3	-860.4443	-860.2838	-860.3185			
	Τ4	-785.4129	-785.2448	-785.2804			

-830.6484

-1383.6750

-1537.3152

-3.3258

-4.1415

-3.5768

-1.5687

-1.0040

-0.2510

-4.5180 -0.3765

-830.6017

-1383.6138

-1537.2524

-1690.2825 -1690.8912 -1690.9673

-1615.2531 -1615.8537 -1615.9294

IL

IL/T1

IL/T2

IL/T3

IL/T4

-830.8319

-1383.9109

-1537.5968

جدول۵. انرژی الکترون، انرژی نقطه صفر، انرژی آزاد گیپس(هارتری) در دمای صفر درجه سانتیگراد



نمودار ۱.بررسی انرژی تیوفن با مایع یونی قبل و بعد از برهمکنش با مایع یونی

۳.نتیجه گیری

در این مطالعه از روش DFT برای بررسی مکانیسم استخراج ترکیبات گوگردی حلقوی با مایع یونی استفاده شد. دادهها نشان میدهند که ترکیبهای گوگردی با تشکیل پیوند هیدروژنی و واندروالسی برای استخراج با این مایع یونی تمایل دارند. بخش آنیونی مایع یونی در این استخراج نقش بیشتری دارد. به این دلیل که بخش آنیونی پیوندهای هیدروژنی قویتری با ترکیب گوگردی ایجاد میکند. تجزیه و تحلیل TS با استفاده از AIM2000 انجام شد. نوع برهمکنشها مشخص شد. با توجه به انرژیهای بدست آمده TS بیشتر به فراورده شباهت دارد. برای ترکیبهای حلقوی گوگردی بدون شاخه مکانیسم استخراج بر اساس تشکیل پیوند هیدروژنی است. اما در ترکیب گوگردی حلقوی شاخهدار مکانیسم اصلی استخراج بر مبنای تشکیل پیوند واندروالسی و پیوند هیدروژنی است. اما در ترکیب گوگردی حلقوی شاخهدار مکانیسم اصلی استخراج بر مبنای تشکیل پیوند متفاوت است. برهمکنشهای π-LP بین آنیون و کاتیون مایع یونی با جذب ترکیب گوگردی از بین نمیرود. در حالی که چگالی الکترونی در اطراف آنیون مایع یونی و S ترکیب گوگردی با تشکیل کمپلکس تغییر میکند. مطالعه بر روی فعل و انفعالات مایع یونی و ترکیبهای گوگردی درک جامعی از مکانیسم استخراج توسط مایع یونی میدهد و برای طراحی مایعهای یونی مفید خواهد بود.

منابع

1. Hassan ERE, Bouroukba FM. (2015). Experimental and theorical study of carbohydrate-ionic liquid interaction, *Carbohydrate Polymers* 127, 316-324, http://doi.org/10.1016/j.carbpol.2015.03.042.

2.Kianpour E, Azizian S, Yarie M, Zolfigol M. A, Bayat M.(2016). A task-specifiphosphonium ionic liquid as an efficient extractant for green desulfurization of liquid fuel: An experimental and computational study. *Chemical Engineering Journal* 295, 500-508, http://doi.org/10.1016/j.cej.2016.03.072.

3.RafieiMoghadam F, AzizianS, Bayat M, Yarie M, Kianpour E,Zolfigol M.A.(2017).Extractive desulfurization of liquid fuel by using a green, neutral andtask specific phosphonium ionic liquid with glyceryl moiety: A joint, experimental and computationalstudy. *Fuel* 208, 214-222, http://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.07.025.

4.V.C. Srivastava,(2012). An evaluation of desulfurization technologies for sulfur removal from liquid fuels, *Rsc Advances* 2, 759-783, http://doi.org/10.1039/C1RA00309G.

5. J. Eßer, P. Wasserscheid, A. Jess, (2004). Deep desulfurization of oil refinery streams by extraction with ionic liquids, *Green Chem.*6, 316-322, http://doi.org/10.1039/B407028C.

6. Xun S, Zhu W, Zheng D, Li H, Jiang W, Zhang M, et al.(2015). Supported ionic liquid [Bmim] FeCl4/Am TiO2 as an efficient catalyst for the catalytic oxidative desulfurization of fuels. *RSC Adv* 5, 43528–36,http://doi.org/10.1039/C5RA00999E.

7. MjalliFarouq S, Ahmed Omar U, Al-Wahaibi T, Al-Wahaibi Y, AlNashefInas M.(2014). Deep

oxidative desulfurization of liquid fuels. *Rev. Chem. Eng.* 30, 330- 337,http://doi.org/10.1515/ revce-2014-0001. 8. Abro R, Abdeltawab A A, Al-Deyab S S, Yu G, Qazi A. B., Gao S., Chen X.(2014). A review of extractive

desulfurization of fuel oils using ionic liquids. *RSC Adv.* 67, 35302-35317,http://doi.org/10.1039/C4RA03478C. 9. Samokhvalov A, Tatarchuk B J. (2010). Review of Experimental Characterization of Active Sites and Determination of Molecular Mechanisms of Adsorption, Desorption and Regeneration of the Deep and Ultradeep Desulfurization Sorbents for Liquid Fuels. *Catal. Rev.* 52, 381-410, http://doi.org/ 10.1080/01614940.2010.498749.

10. Dharaskar SA, Wasewar KL, Varma MN, Shende DZ, Tadi KK, Yoo CK.(2014). Synthesis, characterization, and application of novel trihexyltetradecylphosphoniumbis (2, 4, 4-trimethylpentyl) phosphinate for extractive desulfurization of liquid fuel. *Fuel Process Technol* 123, 1–10.http://doi.org/10.1016/j.fuproc.2014.02.001.

11. Wang L, Jin G, Xu Y. (2019).Desulfurization of coal using four ionic liquids with [HSO4]–,*Fuel* 236, 1181-1190, http://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.09.082.

12. Li FT, Wu B, Liu RH, Wang XJ, Chen LJ, Zhao DS. (2015). An inexpensive N-methyl-2- pyrrolidone-based ionic liquid as efficient extractant and catalyst for desulfurization of dibenzothiophene .*Chem Eng. J.* 274, 192–9,http://doi.org/10.1016/j.cej.2015.04.027.

13. Ding W, Zhu W, Xiong J, Yang L, Wei A, Zhang M, et al. (2015). Novel heterogeneous iron-based redox ionic liquid supported on SBA-15 for deep oxidative desulfurization of fuels. *Chem. Eng. J.* 266, 213–221,http://doi.org/10.1016/j.cej.2014.12.040.

14 . Ahmed OU, Mjalli FS, Al Wahaibi T, Al-Waheibi YM, (2015). AlNashef IM. Optimum Performance of Extractive Desulfurization of Liquid Fuels using Phosphonium and Pyrrolidinium-Based Ionic Liquids. *I&EC Reaserch*, 54,6540-6550, http://oi.org/10.1021/acs.iecr.5b01187.

15 .Abro R, AbdeltawabA.A., Al-Deyab S.S., Yu G, Qazi A.B., GaoaS., Chen X. A. (2019) .Review of extractive desulfurization of fuel oils using ionic liquids. *Royal Society of Chemistry* 4,35302–35317, http://doi.org/10.1039/C4RA03478C.

16. Dharaskar S, Sillanpaa M, Wasewar K, Walvekar R. Feasibility Study Of Phosphonium Ionic Liquids As Efficient Solvent For Sulfur Extraction From Liquid Fuels, *AIP Conference Proceedings* 2137, 020002-2 - 020002-10, http://doi.org/10.1063/1.5120978.



بررسی تئوری-عملی افزایش برداشت نفت با روش تئوری تابعیت چگالی: استفاده از استامینوفن بهعنوان دمولسیفایر

اسدالله فرهادی * *، رضا رحیمی ۲، محمدعلی قدری ۲

 ا. استادیار ، شیمی فیزیک-آلی، علوم پایه و زبان خارجی،دانشکده صنعت نفت اهواز و دانشگاه صنعت نفت Department of Basic Sciences, Petroleum University of Technology, Ahvaz, Iran
 ۲. دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی نفت، نفت دانشکده صنعت نفت اهواز و دانشگاه صنعت نفت Department of Petroleum Engineering, Petroleum University of Technology Ahvaz, Iran

واژگان كليدى: تئورى، عملى، روش تابعيت چگالى، افزايش برداشت نفت، سورفكتانت، استامينوفن

۱– مقدمه

در سالهای اخیر ساختار ذخایر هیدروکربنی در حال تغییر بوده است. به ویژه، نسبت نفت خام سنگین که به سختی قابل بازیابی است. در عین حال، بیشتر میادین نفتی قدیمی با پرآبی و ذخایر قابل توجهی از باقیمانده نفت که به طور متوسط ۵۵ تا ۷۵ درصد از ذخایر اثبات شده را تشکیل میدهند. اخیرا، چهار روش برای افزایش برداشت نفت از چنین مخازن پیشنهاد شد. یکی از این روشها استفاده از مواد شیمیایی که باعث کاهش برهمکنش آب و نفت شده و در نهایت منجر به تولید بیشتر نفت خواهد شد[۱]. بررسی برهمکنشهای بین ترکیبات آلی به ویژه ترکیبات سورفکتانتها با مشتقات نفتی در سالهای اخیر به طور گسترده از طریق مدل سازی مولکولی، شبیه سازی تئوری تابعیت چگالی (DFT) و دینامیک مولکولی (MD) مورد مطالعه قرار گرفته است. هر دو تکنیکهای قدرتمندی هستند که برای ارزیابی برهمکنشهای مولکولی استفاده می شوند[۲]. بنابراین در این پروژه بررسی برهمکنش بین برخی از ترکیبات موجود در نفت خام میدان نفتی بگستان اهواز با سورفکتانت استامینوفن به

۲- بخش تجربی و تئوری

⁴⁰ میلی لیتر نفت خام سنگین میدان نفتی اهواز-بنگستان را با ۵ میلی لیتر آب مقطر در یک بشر مخلوط شده و به مدت (ppm) مدا دقیقه توسط همزن مغناطیسی با دور ۱۰۰۰ هم زده شد. سپس مخلوطهای با غلطتهای ۱۰۰، ۳۰۰ و ۵۰۰ (ppm) از استامینوفن مایع تهیه گردید. مخلوط واکنش در استوانه مدرجه ریخته و در مکان ثابتی قرار دادهشد بعد از ۱۰ دقیقه حجم آب جدا شده برای مقادیر استامینوفن ذکر شده ۱۵، ۲۰ و ۳۰ درصد به ترتیب اندازه گیری شد. همچنین کشش سطحی این سورفکتانت با ترکیبات نفتی (IFT) برای نمونه با غلطت ای گری شد محین نیروی وارده بر قطره ایا سطحی این سورفکتانت با ترکیبات نفتی (IFT) برای نمونه با غلطت ۳۰۰ و ۲۰۰ میری شد که میزان نیروی وارده بر قطره ایجاد شده سورفکتانت با ترکیبات نفتی (IFT) برای نمونه با غلطت ۳۰۰ معرفی که با قطرات نفت و آب ایجاد میکند باعث میشود که قطرات نفت در کنار همدیگر قراربگیرند و باعث سنگینتر شدن و در نهایت جداسازی امولسیون نفت-آب شود. شکل ۱ دقیقا طرات نفت در کنار همدیگر قراربگیرند و باعث سنگینتر شدن و در نهایت جداسازی امولسیون نفت-آب شود. شکل ۱ دقیقا براساس همین برهمکنش ایجاد می وارد بر معدرا فلیر ای به می سنگین را در یا را سازی ایران در این تحقیق برای بررسی بهتر می سازی ایروی وارده بر مدی ا در یا می وارات نفت و آب ایجاد می این ایا در ایا در این ایروی وارده با غلط ای در ساز و در نهایت جداسازی امولسیون نفت-آب شود. شکل ۱ دقیقا براساس همین برهمکنش ایجاد میشود که مقدرا فشار وارد بر سطح قطره محاسبه میباشد. در این تحقیق برای بررسی بهتر سازی کران می ای ای ای و برخی از ترکیبات

موجود در نفت خام با کمک روش تئوری تابعیت چگالی با دستور پایه B3LYP/6-31G انجام شد. در این پروژه علاوه بر بهینه کردن انرژی برهمکنش بین استامینوفن با آب، نرمال هپتان، بنزن و نرمال هگزان محاسبه گردید. (جدول ۱) همچنین انرژی تشکیل دمولسیفایر (IFE) برای مولکول استامینوفن-آب-نرمال هگزان با استفاده از رابطه ۱ و به روش محاسباتی انجام شد و مقدار آن ۱۲/۹۱۵ محاسبه گردید. (جدول ۲)

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ تان ۱۴۰۳



شکل ۱: تجزیه و تحلیل قطره آویز استامینوفن بهعنوان دمولسیفایر

 $IFE = \frac{E_{total} - (nE_{demulsifier} + E_{oil-water})}{n}$

(١)

جدول ۱: انرژی (۵.u) برهمکنش بین استامینوفن با ترکیبات مخلوط امولسیون

استامينوفن-آب	استامينوفن-نرمال هپتان	استامينوفن-نرمال هگزان	استامينوفن-بنزن
-291/765	-741/872	-Y&Y/T&A	-747/742
حلاليت (گرم / ليتر)	در ۳۰ درجه سانتیگراد		
بنزن (C⁰ ۳۰)	۱/۸۴ نرمال هگزان (C⁰C)	$9/\Delta \times 1 \cdot -^{-r}$	نرمال هپتان (C⁰C) >۱/۱

جدول ۲: محاسبه انرژی (a.u.) تشکیل دمولسیفایر استامینوفن برای مخلوط نفت-آب (ترکیبات جدول ۱)							
IFE for n-hexane	E acetaminophene	n-heptane-water	n-hexane-water	Benzene-water			
17/910	_010/71/	- 31/11 .	_~~~~	_~.\/0/1			

۳- نتیجه گیری

نتایج گزارش شده در جداول ۱ و۲ نشان میدهند که مولکولهای هیدروکربنی کوچک برهمکنش خوبی با آب دارند زیرا انرژی برهمکنش آنها با آب منفی است به همین دلیل این ترکیبات دارای حلالیتی نسبتا خوبی در آب هستند. حلالیت این ترکیبت در آب در مقیاس میکروسکپی بصورت امولسیونی میباشند. باتوجه به اهمیت ازدیاد برداشت بیشتر نفت از چاه استفاده از سورفکتانت استامینوفن به عنوان دمولیسفایر در این روش بسیار موثر عمل کرد زیرا این ترکیب بخاطر داشتن برهمکنش های از نوع n-p و p-p باعث شکستن سیستم تعلیقی شده و در نهایت با توجه به دادههای تجربی میزان ازدیاد برداشت بیشتری مشاهده میشود (IFT). یکی از دلایلی که میزان درصد آب جداسازی شده کم میباشد به دلیل مثبت بودن IFE این برهمکنش میباشد.

14.1

منابع و مراجع

- [1] Massarweh, O., & Abushaikha, A.S. (2020) The use of surfactants in enhanced oil recovery: A review of recent advances. Energy Reports, 6, 3150–3178.
- [2] Cheng, J., Xu, J., Yang, J., Lv, W., Lian, C., & Liu, H. (2022) Enhanced oil recovery by sacrificing polyelectrolyte to reduce surfactant adsorption: A classical density functional theory study. Chemical Engineering Science, 261, 117957.



محاسبهی ویژگیهای توپولوژیک با تابع ونیر برای نیمههادی نیکل-بنزن هگزاتیول

نفیسه فلسفی^۲، فریبا نظری^۱

۱ و *-دانشیار، شیمی فیزیک، شیمی و دانشگاه تحصیلات تکمیلی در علوم پایهی زنجان، nazari@iasbs.ac.ir ۲- دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، شیمی و دانشگاه تحصیلات تکمیلی در علوم پایهی زنجان، n.falsafi@iasbs.ac.ir

واژگان کلیدی: چارچوب آلی-فلزی، عایق توپولوژیک، ناوردای توپولوژیک، تابع ونیر، مرکز بار ونیر هیبریدی

۱– مقدمه

بیست و هفت درصد از مواد موجود در طبیعت دارای خاصیت توپولوژیک هستند. از اینرو شناخت ویژگیهای توپولوژیک نقش مهمی در شناخت دنیای اطراف ما بازی می *کند. مواد توپولوژیک بهدلیل ماهیت منحصر بهفرد خود، در اسپین ترونیک و کامپیوترهای کوانتومی کاربرد دارند. یک گروه از مواد با خاصیت توپولوژیک، عایقهای توپولوژیک هستند که مشخصهی آنها کامپیوترهای کوانتومی کاربرد دارند. یک گروه از مواد با خاصیت توپولوژیک، عایقهای توپولوژیک هستند که مشخصهی آنها تو حالت دارای می کند. مواد توپولوژیک به دلیل ماهیت منحصر به فرد خود، در اسپین ترونیک و کامپیوترهای کوانتومی کاربرد دارند. یک گروه از مواد با خاصیت توپولوژیک، عایقهای توپولوژیک هستند که مشخصهی آنها توده یا یا و حالتهای سطحی (در نسخه ی سهبعدی) یا لبه (در نسخه ی دوبعدی) هادی است. مواد توپولوژیک با ناورداهای توپولوژیک شناخته می شوند و روش های مختلفی برای محاسبه ی آنها معرفی شده است. یک روش ساده و کارآمد بر پایه ی مرکز بار ونیر است که با ناوردای توپولوژیک ارتباط دارد. تابعهای ونیر تابعهای جای گزیدهای هستند که مطابق با رابطهی (۱) توپولوژیک شناخته می شوند و روش های مختلفی برای محاسبه ی آنها معرفی شده است. یک روش ساده و کارآمد بر پایه مرکز بار ونیر است که با ناوردای توپولوژیک ارتباط دارد. تابعهای ونیر تابعهای جای گزیده یه هستند که مطابق با رابطه ی (۱) از تبدیل فوریه ی تابعهای بلوخ به دست می آیند.*

$$|w_{n,R}\rangle = \frac{v_{cell}}{(2\pi)^3} \int_{BZ} e^{-ik.R} |\psi_{nk}\rangle d^3k \tag{1}$$
invariant of the set of t

از نظر مارزاری و وندربیلت بهترین شکل ماتریس U زمانی بهدست میآید که تابع پراکندگی ونیر (رابطهی (۳)) کمینه شود. با انجام اینکار تابع ونیر بهدست آمده دارای حداکثر جایگزیدگی خواهد بود.

 $\Omega_{spread} = \sum_{n=1}^{J} [\langle w_{n,0}(\boldsymbol{r}) | r^2 | w_{n,0}(\boldsymbol{r}) \rangle - (\langle w_{n,0}(\boldsymbol{r}) | \hat{\boldsymbol{r}} | w_{n,0}(\boldsymbol{r}) \rangle)^2] = \sum_{n=1}^{J} [\langle r^2 \rangle_n - \bar{\boldsymbol{r}}_n^2]$ (٣) In the set of the set

$$|w_{n,R_{x}},k_{y},k_{z}\rangle = \frac{a_{x}}{2\pi} \int_{-\pi/a_{x}}^{\pi/a_{x}} e^{-ik_{x}\cdot R_{x}} |\psi_{nk}\rangle \, dk_{x}$$
(f)

رابطهی بین تابعهای ونیر و ویژگیهای توپولوژیک با مرکز بار ونیر هیبریدی تعریف میشود که رابطهی (۵) مرکز بار ونیر هیبریدی سامانهی دوبعدی جایگزیده در راستای x را نشان میدهد.

$$\bar{x}(k_y) = \langle w_{n,0}, k_y | \hat{x} | w_{n,0}, k_y \rangle = \frac{a_x}{2\pi} \int_0^{2\pi/a_x} A_n(k_x, k_y) dk_x = \frac{a_x}{2\pi} \phi_n$$
 (Δ)

کمیتهای توپولوژیک در رابطهی (۵) اتصال بری A_n و فاز بری ϕ_n هستند که مطابق رابطهی (۶) تعریف میشوند. $\phi_n = \oint A_n(k). dk$, $A_n(k) = \langle u_{nk} | i \nabla_k u_{nk} \rangle$ (۶) (۶) با توجه به مفهوم فاز بری معرفی شده توسط مایکل بری (Berry, 1984) و با نگاهی به تحول مرکز بار ونیر (هیبریدی) ناوردای توپولوژیک (مطابق با رابطهی ۸) بهدست میآید.

دانگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پاران ۱۴۰۳

$$\bar{x}_n \left(k_y = \frac{2\pi}{a_y} \right) - \bar{x}_n \left(k_y = 0 \right) = \frac{a_x}{2\pi} \left[\oint A_n \left(k_y = \frac{2\pi}{a_y}, k_x \right) dk_x - \oint A_n \left(k_y = 0, k_x \right) dk_x \right]$$
(Y)

$$\bar{x}_n\left(k_y = \frac{2\pi}{a_y}\right) - \bar{x}_n\left(k_y = 0\right) = \frac{a_x}{2\pi} \iint_{BZ} \nabla \times A_n\left(k_x, k_y\right) dk_x \, dk_y = \frac{a_x}{2\pi} \iint_{BZ} \Omega_n\left(k_x, k_y\right) dk_x \, dk_y = a_x O_n\left(k_y, k_y\right) dk_y \, dk_y = 0$$

 $\Omega_n = \nabla \times A_n(k)$ عدد چرن (مشخصهی توپولوژیک سامانههای بدون تقارن بازگشت زمانی) است و از انتگرال انحنای بری ($\Lambda_n = \nabla \times A_n(k)$ عدد چرن (مشخصهی توپولوژیک سامانههای بدون تقارن بازگشت زمانی) است و از نظریهی استوکس فراهم شده است. حرکت دورهای مرکز بار ونیر را با توجه به ناحیهی بریلوئن دوبعدی حول استوانه در نظر میگیرند. از اینرو با توجه به تعداد دورهایی که مرکز بار ونیر حول استوانه می پیماید، می توان عدد چرن (و با توجه به جهت چرخش آن، علامت عدد چرن) را مشخص کرد. ناوردای بار ونیر حول استوانه می پیماید، می توان عدد چرن (و با توجه به جهت چرخش آن، علامت عدد چرن) را مشخص کرد. ناوردای دیگری که در سامانههایی با تقارن بازگشت زمانی قابل محاسبه است ناوردای Z_2 (با بهکارگیری رابطههای (1-P)) است. (P) عداد دفعههایی است که هر خط دلخواهی، نمودار تحول مرکزهای بار ونیر هیبریدی را قطع می کند.

$$\vartheta; (\vartheta_x, \vartheta_y, \vartheta_z)$$

$$\vartheta = \Delta (k_i = 0) + \Delta (k_i = 0.5) \mod 2 \quad , \ \vartheta_i = \Delta (k_i = 0.5)$$

$$(1)$$

۲- روش

با آگاهی از دانش فیزیکی معرفی شده در بخش مقدمه و به کارگیری ابزارهای محاسبهی ویژگیهای الکترونی همانند کوانتوم اسپرسو که بر پایهی موجهای تخت ناجایگزیده و روش پتانسیل مجازی استوار است و نیز ابزارهای محاسبهی ویژگیهای توپولوژیک مانند ونیر ۹۰ (Mostofi, 2008) و ونیر طولز (Wu, 2018) در این کاربه محاسبهی ویژگیهای سامانهی نیکل-بنزن هگزاتیول پرداخته ایم.

۳- بحث و نتیجه گیری

نیمههادی نیکل-بنزن هگزاتیول دارای شکاف نواری در حدود ۰/۱۲ الکترون ولت و شبکهی کاگومه (شش ضلعیهای احاطه شده با سه ضلعی و برعکس) است. مشخصهی شبکههای کاگومه وجود سه نوار خاص با نام نوارهای کاگومه (یک نوار نسبتا مسطح و دو نوار مشابه مخروط دیراک گرافن) است. این سه نوار با دو شکاف نواری ناشی از برهمکنش اسپین- مدار (شکاف غیربدیهی) از هم جدا می شوند. وجود سطح فرمی در یکی از این دو شکاف نواری استفاده از این چارچوبهای آلی-فلزی را در این ابزارها کارآمد می سازه کارآمد می شدی با نام نوارهای کاگومه (یک نوار نسبتا معربدیهی) از هم جدا می شوند. وجود سطح فرمی در یکی از این دو شکاف نواری استفاده از این چارچوبهای آلی-فلزی را در ابزارها کارآمد می سازد. با آلاییدن الکترون سطح فرمی این ترکیب به شکاف نواری استفاده از این چارچوبهای آلی-فلزی را در می شود. ناوردای تولوژیک محاسبه شده برای این سامانهی دوبعدی آلاییده شده با الکترون برابر با 1=22 است. نتیجهی می شود. ناوردای تولوژیک محاسبه شده برای این سامانه دوبعدی آلاییده شده با الکترون برابر با 1=22 است. نتیجهی می شدست آمده نشان داد که ساختار نیکل-بنزن هگزاتیول نیازمند آلاییدن الکترون برای این سامانهی دوبعدی آلاییده شده با الکترون برابر با 1=22 است. نتیجهی بیدست آمده نشان داد که ساختار نیکل-بنزن هگزاتیول نیازمند آلاییدن الکترون برای رای دوبعدی است. در شکل ۱ ساختار اتمی، الکترونی و حول مرکزهای بار ونیر هیبریدی این سامانه نشان داده شده است.

C ● (b) _{Ni} ● (c) $1.0 \\ 0.8$ 0.6 0.0 0.4 ka 0.5 0.0 (c)1 02 0 -0.2 0.0 0.5 0.0 -0.4 k. (c)1 -0.6 -0.8 -1.0 M

شکل ۱: ساختار اتمی (a)، الکترونی (b) و توپولوژیک (c) عایق توپولوژیک آلی دو بعدی نیکل-بنزن هگزاتیول.

منابع و مراجع

[1] Berry, M.V. (**1984**). Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 392 (1802), 45-57.

[2] D. Vanderbilt. (2018). Berry phases in electronic structure theory: electric polarization, orbital magnetization and topological insulators, *Cambridge University Press*.

[3] Marzari, N., Mostofi, A.A., Yates, J.R., Souza, I. and Vanderbilt, D. (2012). Maximally localized Wannier functions: Theory and applications. *Reviews of Modern Physics*, 84 (4), 1419-1475.

[4] Gresch, D., Autes, G., Yazyev, O.V., Troyer, M., Vanderbilt, D., Bernevig, B.A. and Soluyanov, A.A. (2017). Z_2 Pack: Numerical implementation of hybrid Wannier centers for identifying topological materials. *Physical Review B*, 95(7), 075146-075170.

[5] Mostofi, A.A., Yates, J.R., Lee, Y.S., Souza, I., Vanderbilt, D. and Marzari, N. (**2008**). wannier90: A tool for obtaining maximally-localized Wannier functions. *Computer physics communications*, 178 (9), 685-699.

[6] Wu, Q., Zhang, S., Song, H.F., Troyer, M. and Soluyanov, A.A. (2018). WannierTools: An open-source software package for novel topological materials. *Computer Physics Communications*, 224, 405-416.



بررسی فعالیت بیولوژیکی یک مشتق پیریدو[d-۲،۳] پیریمیدین بر اساس محاسبات DFT و شبیه سازی داکینگ مولکولی

مهران فیضی-ده نایبی^{او*}، قدسی محمدی زیارانی^{۲و*}، علیرضا بدیعی^۳

۱ و * پژهشگر پسادکترا، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی آلی، دانشکده شیمی و دانشگاه الزهرا، (m.feizi@alzahra.ac.ir)) ۲ و * استاد تمام ، رشته شیمی آلی، گروه شیمی آلی، دانشکده شیمی و دانشگاه الزهرا، (gmohammadi@alzahra.ac.ir) ۳- استاد تمام ، رشته نانو شیمی، گروه شیمی ، دانشکده شیمی، پردیس علوم و دانشگاه تهران، (abadiei@ut.ac.ir)

واژگان كليدى: فعاليت بيولوژيكى، تئورى تابعى چگالى، تمايل پيوندى، شبيه سازى داكينگ.

۱– مقدمه

در طول سال های گذشته، اوراسیل و مشتقات آن مانند پیریدو [2,3-d] پیریمیدین ها به دلیل فعالیت های بیولوژیکی متعددی مانند، ضد باکتری (Nargund, 1991)، ضد حساسیت (Hermecz, 1984) و ضد میکروبی مورد توجه قرار گرفته اند. از طرفی، امروزه مرگ و میر ناشی از بیماری سرطان بیشتر از سایر بیماری ها می باشد. به همین دلیل در این مقاله ما یک ترکیب از مشتقات این گروه را به منظور بررسی رفتار ضدسرطانی آن ها از طریق روش های محاسباتی ارائه می کنیم.

> ۲- روش ها ۲-۱- سنتز مشتق تتراهیدروپیریدو[d-۲،۳] پیریمیدین (Ar = C₆H5 ،4a) ترکیب مورد نظر طبق مقاله قبلی سنتز و شناسایی شد (Ziarani, 2015).

۲-۲ روش های محاسباتی

با استفاده از روش محاسباتی تئوری تابعی چگالی (DFT)، می توان اطلاعات ساختاری، پایداری، خاصیت بیولوژیکی و همچنین مکان های فعال روی یک ترکیب برای برهم کنش با ماکرومولکول های زیستی را بررسی کرد. ترکیب سنتز شده با استفاده از محاسبات DFT با روش عملکردی B3LYP، با استفاده از بسته نرمافزاری Gaussian 09W مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. تنظیمات DFT با استفاده از نرم افزار GaussView 6.0 انتخاب شد و فایل حاصل به عنوان ورودی برای بهینه سازی ساختاری مورد استفاده قرار گرفت. مجموعه پایه استفاده شده برای تمامی اتم ها، مجموعه پایه (d,p) می باشد. از طرف دیگر، مطالعه شبیه سازی داکینگ مولکولی توسط نرم افزار اتوداک و اتوداک تولز به منظور بررسی خاصیت ضدسرطانی ترکیب مورد نظر انجام شد. در انتها، پیشبینی خواص دارویی ترکیب سنتز شده توسط تجزیه و تحلیل ADMET با استفاده از نرم افزار SIRIS DataWarrior 5.2.1 با استفاده از

۳- بحث

بهینه سازی کامل هندسی ترکیب 44 با استفاده از روش (d,p) gltP7/B3LYP/6-311g به دست آمد. هندسه بهینه سازی شده این ترکیب نشان می دهد که انرژی الکترونیکی در حالت پایه ۹۶۳/۴۲ – هارتری است و پیکربندی آن در شکل (a)1 نشان شده است. نقشه شده است. از طرفی نقشه ی پتانسیل الکترواستاتیکی (MEP) این ترکیب در شکل (b)1 نشان داده شده است. نقشه مقله الکترون نقشان دادن مکان های واکنشی روی ترکیب برای حمله الکترون دوست و هسته دوست است. نقشه مقلم برای نشان دادن مکان های واکنشی روی ترکیب برای حمله الکترون دوست و هسته دوست است. نقشه مقلم مهم برای نشان دادن مکان های واکنشی روی ترکیب برای حمله الکترون دوست و هسته دوست است. نقشه مقلم مهم برای نشان دادن مکان های واکنشی روی ترکیب برای حمله الکترون دوست و هسته دوست است. نقشه مقله مای مهم برای نشان دادن مکان های واکنشی روی ترکیب برای حمله الکترون دوست و هسته دوست است. مقلمه مال مای مولکنی مهم برای نشان دادن مکان های واکنشی روی ترکیب برای حمله الکترون دوست و هسته دوست است. اتم های 10، 20 و 10 متمرکز شده است، که نشان می دهد این مناطق اهداف مناسبی برای واکنش های الکترون دوستی هستند (40 ای 20 معرکز شده است، که نشان می دهد این مناطق اهداف مناسبی برای واکنش های الکترون دوستی هستند (40 می 200 معرکز شده است، که نشان می دهد این مناطق اهداف مناسبی برای واکنش های الکترون دوستی هستند (40 معرکز است، که نشان می دهد این مناطق اهداف مناسبی برای واکنش های الکترون دوستی هستند (40 معرکز است، که نشان می دهد این مناطق مکانهای ایده آلی برای واکنشهای هسته دوست یا برهم کنشهای هستند (40 معرکز است، که نشان می دهد این مناطق مکانهای ایده آلی برای واکنشهای هسته دوست یا برهم کنشهای می دولوژیکی با درشت مولکولی هم و لومو ترکیب ها در شکل (20 انشان می دهد است. انرژی گپ بدست آمده برای این ترکیب برابر با ۲۷/۲ اکترون ولت است. شکاف انرژی کمتر بین سطوح هومو و لومو نشان ده دهده واکنش پذیری شیمیایی و فعالیت بیولوژیکی بالایی دارد. به همین علت، ما شبیه سازی داکینگ مولکولی این دهند مرو مولکولی این ترکیب را با سلول هدف پروتئین سرطان پستان (20 ال 20 ال 20 ال 20 ایت. ولدویم.



شکل ۱: هندسه بهینه (a)، نقشه (b) MEP و سطح هومو و لومو ترکیب سنتز شده (c)

بهترین حالت اتصال با بالاترین انرژی آزاد اتصال منفی (قوی ترین تمایل پیوندی) برای تجزیه و تحلیل داکینگ انتخاب شد. با توجه به شبیه سازی های داکینگ، ترکیب 44 مطابق شکل ۲ به محل فعال پروتئین سرطان سینه متصل می شود. تمایل پیوندی این ترکیب در طول برهم کنش با پروتئین سرطان پستان برابر با ۲/۹۶– کیلوکالری بر مول است. این درحال است که تمایل پیوندی سیس پلاتین به عنوان داروی استاندارد سرطان در برابر این سلول سرطانی برابر با ۵/۹۸– بدست آمد. این نتایج نشان میدهد که ترکیب سنتز شده تمایل پیوندی بیشتری به پروتئین سرطان سینه دارند، که نشاندهنده فعالیت ضد سرطانی بیشتر این ترکیب در مقایسه با سیس پلاتین از لحاظ محاسباتی است. است. بهترین موقعیت اتصال ترکیب 48 در برهم کنش با



شکل ۲ : شبیه سازی داکینگ ترکیب 4a بر روی پروتئین سرطان سینه

۴- نتیجه گیری

در این مقاله، یک ترکیب از مشتقات تتراهیدروپیریدو[۲۰۳-b] پیریمیدین سنتز شد. برای بررسی خواص بیولوژیکی این ترکیب از روش های مختلف محاسباتی از جمله DFT، شبیه سازی داکینگ مولکولی و پیش بینی خواص دارویی استفاده شد. نقشه پتانسیل الکترواستاتیکی این ترکیب، مکان های فعال برای واکنش های هسته دوستی و الکترون دوستی را نشان داد. شکاف انرژی بین اوربیتال های هومو و لومو نشان داد که ترکیب A واکنش پذیری شیمیایی و فعالیت بیولوژیکی بالایی دارد. از طرفی، پیش بینی از روش های هسته دوستی و الکترون دوستی را نشان داد. شکاف انرژی بین اوربیتال های هومو و لومو نشان داد که ترکیب A واکنش پذیری شیمیایی و فعالیت بیولوژیکی بالایی دارد. از طرفی، پیش بینی اثرات دارویی نشان داد هیچ اثرات تومور زایی و جهش ژنی برای این ترکیب وجود ندارد. با توجه به نتایج مولفی، پیش مینی اثرات دارویی نشان داد هیچ اثرات تومور زایی و جهش ژنی برای این ترکیب وجود ندارد. با توجه به نتایج بهدستآمده، میتوان نتیجه گرفت که ترکیب A4، ترکیب فعال زیستی است و به طور مؤثری با محل فعال پروتئین سرطان سرطان می از مان داد. می می می می می می می می از می تو می از این ترکیب و مود ندارد. با توجه به نتایج به می شرای این ترکیب و می می رای این ترکیب و مود ندان داد که ترکیب ما می شرین این ترکیب و مود ندارد. با توجه به نتایج می می می می از از می از می می می رای این ترکیب و مود ندارد. با توجه به نتاین سرطان به دستآمده، می توان نتیجه گرفت که ترکیب ما داری و عالی زیستی است و به طور مؤثری با محل فعال پروتئین سرطان سینه متصل می شود. بنابراین، شبیه سازی داکینگ مولکولی فعالیت ضد سرطانی این ترکیب را از طریق تمایل پیوند قوی آن با

پروتئین سرطان سینه تأیید میکند. با توجه به نتایج محاسباتی امیدوارکننده پیرامون خواص بیولوژیکی این ترکیب، می توان از روش ها آزمایشگاهی نیز برای بررسی بیشتر این ترکیب استفاده کرد.

منابع و مراجع

[1] Nargund, L., Reddy, Y., & Jose, R. (**1991**). Synthesis and Antibacterial Activity of Pyrido [1, 2-a] pyrimidin-4 (1H)—Ones. *Indian Drugs*, *29*(1), 45-46.

[2] Hermecz, I., Horvath, A., Meszaros, Z., De Vos, C., & Rodriguez, L. (1984). Nitrogen bridgehead compounds.
44. New antiallergic 4H-pyrido [1, 2-a] pyrimidin-4-ones. 4. *Journal of medicinal chemistry*, 27(10), 1253-1259.
[3] Ziarani, G. M., Nasab, N. H., Rahimifard, M., & Soorki, A. A. (2015). One-pot synthesis of pyrido [2, 3-d] pyrimidine derivatives using sulfonic acid functionalized SBA-15 and the study on their antimicrobial activities. *Journal of Saudi Chemical Society*, 19(6), 676-681.

[4] Zinatloo-Ajabshir, S., Rakhshani, S., Mehrabadi, Z., Farsadrooh, M., Feizi-Dehnayebi, M., Rakhshani, S., Dušek, M., Eigner, V., Rtimi, S., & Aminabhavi, T. M. (**2024**). Novel rod-like [Cu (phen) 2 (OAc)] · PF6 complex for high-performance visible-light-driven photocatalytic degradation of hazardous organic dyes: DFT approach, Hirshfeld and fingerprint plot analysis. *Journal of Environmental Management*, *350*, 119545.

[5] Rossi, A., Stagno, C., Piperno, A., Iraci, N., Panseri, S., Montesi, M., Feizi-Dehnayebi, M., Bassi, G., Di Pietro, M. L., & Micale, N. (**2024**). Anticancer activity and morphological analysis of Pt (II) complexes: Their DFT approach, docking simulation, and ADME-Tox profiling. *Applied Organometallic Chemistry*, *38*(5), e7403.



مطالعهی تولید هیدروژن از تفکیک اتانول بر روی سطح کاتالیزگر (Ni(100 با استفاده از شبیهسازی مونتکارلوی سینتیکی

پروانه کبوتری^{او*}، حدیث بشیری^۲

۱ - دانشجوی دکتری، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی دانشگاه کاشان، (p-k-1987@yahoo.com) ۲ - دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه کاشان، (hbashiri.kashanu.ac.ir)

واژگان كليدى: توليد هيدروژن، مونت كارلوى سينتيكي، الكلها

۱– مقدمه

سوختهای فسیلی منجر به افزایش گازهای گلخانهای و مشکلات زیست محیطی شدهاند. گاز هیدروژن یک منبع جایگزین مناسب است. تولید هیدروژن از الکلها بهویژه اتانول به دلیل مزیتهایی چون چگالی انرژی بالا، تجدید پذیری و سهولت ذخیره سازی مورد توجه قرار دارد[۱]. استفاده کاتالیزگرهای نیکل و پالادیوم نیز به طور گستردهای در واکنشهای هیدروژنی مورد توجه است[۲]. مکانیسمهای واکنش شیمیایی روی سطوح، اهمیت زیادی دارد. استفاده از شبیهسازی دینامیک مونت کارلو (DMC) بهعنوان یک ابزار قدرتمند امکان بررسی دقیقتر و مدلسازی کمی از این واکنشها را فراهم می کند. هدف اصلی این کار استفاده از شبیهسازی DMC مدل شبکه-گاز برای بررسی فرآیند تولید هیدروژن از تجزیه اتانول بر روی (TPD) مقایسه است[۳]. در پایان، نتایج بهدستآمده از شبیهسازی با دادههای تجربی مربوط به برنامهریزی دمایی واجذب (TPD) مقایسه میشوند.

۲- روش کار

در این مطالعه با طراحی مکانیسمی برای تجزیهی اتانول روی سطح کاتالیزگر (Ni(100 و مشخص کردن مقدارهای انرژی فعالسازی و ضرایب آرنیوس برای هر مرحله از واکنش با استفاده از برنامه CARLOS توانستیم نمودارهای TPD کار شبیهسازی و تجربی را برهم تطابق دهیم.

۳- بحث ونتيجهگيري

پس از آزمون و خطاهای بسیار توانستیم مکانیسمی که در جدول ۱ مشاهده می کنید را برای تجزیه یا تانول روی سطح کاتالیزگر (Ni(100 پیشنهاد بدهیم. محصولات این مکانیسم متان، مونوکسید کربن و هیدروژن هستند. همان گونه که در شکل ۱ می بینید نمودار TPD حاصل از شبیه سازی مکانیسم پیشنهادی ما تطابق و هم پوشانی بسیار خوبی با نمودار TPD حاصل از آزمایش تجربی دارد [۴].



جدول ۱: مکانیسم پیشنهادی و دادههای سینتیکی مربوطه

مرحله	مراحل واكنش	$\upsilon \left(\frac{1}{s}\right)$	E _a (kJ/mol)
١	$CH_3CH_2OD + * \rightarrow CH_3CH_2OD_{(ads)}$	۲۳/۰×۱۰۵	•/••
٢	$CH_3CH_2OD_{(ads)} \rightarrow CH_3CHOD_{(ads)} + H_{(ads)}$	• \/ \× \ • [\] "	۸۹/۱۱
٣	$CH_3CHOD_{(ads)} \rightarrow CH_3CHO_{(ads)} + D_{(ads)}$	۲۰/۶×۱۰ ^{۱۳}	۵۱/۸۸
۴	$CH_3CHO_{(ads)} \rightarrow CH_3CO_{(ads)} + H_{(ads)}$	• 1/1×1•1 ⁴	27/40
۵	$CH_{3}CO_{(ads)} \rightarrow CH_{3(ads)} + CO_{(ads)}$	Ψ1/Δ×1· ^{1Δ}	184/88
۶	$CH_{3(ads)}+H_{(ads)}\rightarrow CH_{4(ads)}$	··/\×\· ^{\۴}	۵۳/۹۷
Y	$H_{(ads)} + H_{(ads)} \rightarrow H_{2(des)} + 2^*$	۸۰/۹×۱۰ ^{۱۴}	٩۶/۵٩
٨	$H_{(ads)} + * \rightarrow * + H_{(ads)}$	••/\×\• ^{\$}	۳۷/۶۰
٩	$CO_{(ads)} \rightarrow CO_{(des)} + *$	••/٣•×١• ^{١٢}	94/87
١٠	$CO_{(ads)} + * \rightarrow * + CO_{(ads)}$	••/\×\• ^٣	۵/۷۷
١١	$H_{(ads)} + D_{(ads)} \rightarrow HD_{(des)} + 2^*$	· · /۵×۱ · ^{۱۲}	98/94
١٢	$D_{(ads)} + D_{(ads)} \rightarrow D_{2(des)} + 2*$	••/۵×١• ^{١٣}	98/94



شکل ۱ :دادههای تجربی (خط چین) و شبیهسازی (خط ممتد) طیفهای TPD



منابع و مراجع

[1] Kratochwil, T., Wittmann, M., & Küppers, J. (1993). Adsorption of ethanol on Ni(100) surfaces. *Journal of electron spectroscopy and related phenomena*, 64, 609-617.

[2] Li, M., Guo, W., Jiang, R., Zhao, L., & Shan, H. (2010). Decomposition of ethanol on Pd (111): a density functional theory study. *Langmuir*, 26(3), 1879-1888.

[3] Gates, S. M., Russell Jr, J. N., & Yates Jr, J. T. (1986). Bond activation sequence observed in the chemisorption and surface reaction of ethanol on Ni (111). *Surface science*, 171(1), 111-134.

[4] Johnson, S., & Madix, R. J. (1981). Sulfur induced selectivity changes for methanol decomposition on Ni (100). *Surface Science*, *103*(2-3), 361-396.



بررسی تأثیر⁺Na بر پایداری و احتمال تولید یوراسیل و توتومرهای آن با کمک زنجیره مارکوف

زینب کرکنی^۱، شاپور رمضانی^{۲،*}

marya.aryaee@yahoo.com ا - دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه یاسوج، shapour.ramazani@gmail.com ۲ و*- دانشیار ، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه و دانشگاه یاسوج، shapour.ramazani@gmail.com

واژگان كليدى: زنجيره ماركوف، يوراسيل، جهش خودبه خودى

۱– مقدمه

یوراسیل یا پیریمیدین-۲،۴ (۲۰۴۱)-دیون، یکی از اجزای اصلی RNA میباشد که نقش مهمی در کد ژنتیکی و احتمالاً ذخیرهسازی اولیه اطلاعات ژنتیکی دارد. یوراسیل هم به عنوان عامل جهشزا و هم مکانیزمی برای اصلاح DNA عمل میکند. توتومری شدن همانند توتومری کتو-انول یوراسیل میتواند باعث تأثیر چشمگیری بر ساختارهای اتمی نوکلئوتیدها و عملکرد RNA و DNA شده و در طی فرآیندهای همانندسازی و رونویسی، منجر به ناهنجاریهای در جفت شدن بازها گردیده و در نتیجه تغییرات در کد ژنتیکی و وقوع جهشهای خود به خودی را به همراه خواهد داشت. تحقیقات زیادی درباره این توتومرها و برهم کنش آنها با فلزات و رادیکالها انجام شده که نقش آنها در ساختار و انرژی نوکلئوتیدها را بررسی میکنند (۱-۵).

۲- محاسبات ساختارالکترونی و پایداری توتومرها

یوراسیل و توتومرهای آن و تأثیر Na^+ روی پایداری و احتمال تولید آنها با محاسبات اولیه حاصل از برنامه گوسین Na^+ و با کمک زنجیره مارکوف مورد بررسی قرار گرفت. بهینه سازی توتومرها و ساختارهای حاصل از برهمکنش آنها با Na^+ در سطح محاسباتی (MP2/ 6-311G(d, p) و سپس محاسبات تک نقطهای در سطح (CCSD(T) در فاز گازی انجام شد (شکل ۱). پایداری متفاوت توتومرها منجر به احتمال تولید متفاوت آنها شد، بنابراین تمرکز بر روی برآورد احتمال تولید هر توتومر و تأثیر پایداری منفاوت توتومرها منجر به احتمال تولید متفاوت آنها شد، بنابراین تمرکز بر روی برآورد احتمال تولید هر توتومر و تأثیر محضور یون Na^+ بر آن و پایداری توتومرها خواهد بود. پایداری توتومرهای یوراسیل در فاز گازی به صورت زیراست $U_1 > U_2 > U_3 > U_{12} > U_{10} > U_{12} > U_7 > U_{11} > U_4 > U_{15} > U_8 > U_5 > U_{16} > U_8$

۳- زنجیره مارکوف و ساخت ماتریس انتقال برای یوراسیل و توتومرهای آن و تأثیر *Na بر آنها

شکل ۲ فرآیند تکراری تبدیل مولکولی را که با U_1 آغاز می شود، نشان می دهد. حضور U_1 در این زنجیره تکاملی به تبدیل آن از مولکولهای U_2 ، U_2 و U_1 بستگی دارد. ۱۶ زنجیره مارکوف برای هر یک از ۱۶ مولکول (همتاهای Na^+ دار آنها) ایجاد گردید، سپس احتمال تولید هر مولکول در هر زنجیره مشابه با معادلات ۱ تا ۸ محاسبه شد. ماتریس انتقال ۱۶×۱۶ ساخته شد که عناصر سطرها، احتمالات مربوط به سنتز توتومرهای زنجیره از U_1 تا U_2 و محسبه شد. ماتریس انتقال ۱۶×۱۶ ساخته شد گردید، سپس احتمال تولید هر مولکول در هر زنجیره مشابه با معادلات ۱ تا ۸ محاسبه شد. ماتریس انتقال ۱۶×۱۶ ساخته شد که عناصر سطرها، احتمالات مربوط به سنتز توتومرهای زنجیره از U_1 تا U_1 و همچنین کمپلکسهای Na^+ را نشان می دادند و مجموع عناصر هر سطر با با یک است. برای همگرا شدن عناصر ماتریس به مقادیر ثابت لازم بود که ماتریس به طور مکرر در خودش ضرب شود. در جدول ۱ احتمال تغییرات توتومری یوراسیل در دماهای مختلف و با حضور یا عدم حضور Na^+ بر

اساس زنجیره مارکوف بررسی شده است. نتایج نشان میدهند که یوراسیل در حالت U₁ به شدت پایدار چه در حضور سدیم و چه در نبود آن است (با احتمالی بیش از ۹۹۹۹۹۹۹). احتمال تغییر به حالت U₂ اندک است و با افزایش دما یا حضور سدیم کمی بیشتر میشود. اما در سایر حالات مانند U₃ تا U₁₆، این احتمالات بسیار کم هستند. بهطور کلی، افزایش دما و سدیم تأثیر محدودی بر پایداری توتومرها دارد و یوراسیل بهطور عمده در حالت اولیه خود باقی میماند.

جاريين كنفرانس سمى فنرمك ايران

دانشگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳







شکل۲: چرخه مارکوف یوراسیل و توتومرهای آن.





	T=308.15	T=308.15(Na)	T=308.65	T=308.65(Na)	T=309.15	T=309.15(Na)	T=309.65	T=309.65(Na)
U1	0.999999961	0.999999953	0.99999996	0.999999953	0.999999959	0.999999953	0.999999958	0.999999953
U2	3.61E-08	4.37E-08	3.71E-08	4.37E-08	3.81E-08	4.37E-08	3.92E-08	4.37E-08
U3	4.57E-21	7.71E-21	4.90E-21	7.71E-21	5.28E-21	7.71E-21	5.73E-21	7.71E-21
U4	6.37E-14	8.96E-14	6.69E-14	8.96E-14	7.03E-14	8.96E-14	7.38E-14	8.96E-14
U5	1.44E-34	3.46E-34	1.63E-34	3.46E-34	1.86E-34	3.46E-34	2.10E-34	3.46E-34
U6	9.09E-34	2.13E-33	1.03E-33	2.13E-33	1.16E-33	2.13E-33	1.32E-33	2.13E-33
U7	1.99E-21	3.38E-21	2.15E-21	3.38E-21	2.31E-21	3.38E-21	2.51E-21	3.38E-21
U8	4.40E-26	8.44E-26	4.82E-26	8.44E-26	5.28E-26	8.44E-26	5.85E-26	8.44E-26
U9	5.17E-26	9.96E-26	5.67E-26	9.96E-26	6.21E-26	9.96E-26	6.87E-26	9.96E-26
U10	2.48E-09	3.09E-09	2.56E-09	3.09E-09	2.64E-09	3.09E-09	2.73E-09	3.09E-09
U11	9.45E-16	1.40E-15	1.00E-15	1.40E-15	1.05E-15	1.40E-15	1.12E-15	1.40E-15
U12	5.03E-17	7.67E-17	5.35E-17	7.67E-17	5.65E-17	7.67E-17	6.05E-17	7.67E-17
U13	6.15E-21	1.03E-20	6.59E-21	1.03E-20	7.08E-21	1.03E-20	7.69E-21	1.03E-20
U14	3.94E-20	6.48E-20	4.24E-20	6.48E-20	4.52E-20	6.48E-20	4.88E-20	6.48E-20
U15	5.44E-23	9.62E-23	5.89E-23	9.62E-23	6.40E-23	9.62E-23	6.97E-23	9.62E-23
U16	3.80E-33	8.75E-33	4.30E-33	8.75E-33	4.83E-33	8.75E-33	5.48E-33	8.75E-33

جدول۱: احتمال تولید U1 و توتومرهای آن در دماهای ۳۷–۳۵.۵۰ درجه سانتیگراد.

۴–نتیجهگیری

توتومری در یوراسیل، به ویژه در حضور ⁺Na، میتواند بر پایداری ساختار DNA تأثیر بگذارد. ⁺Na میتواند به عنوان واسطه عمل کرده و فرآیند توتومری را تحت تأثیر قرار دهند، به طوری که تشکیل توتومرهای ناپایدار را تسریع کنند. این تغییرات ممکن است باعث بروز خطا در خوانش توالی DNA شوند و به جهشهای نقطهای منجر گردند. در نتیجه، این تغییرات میتوانند عملکرد طبیعی RNA و DNA را مختل کرده و مشکلات ژنتیکی و پاتولوژیهای سلولی مشابهی ایجاد کنند.

منابع و مراجع

[1] Sousa, MML., Krokan, HE., & Slupphaug, G. (2007). DNA-uracil and human pathology. 28,276–306.

[2] Mohammadi, M., & Ramazani, S. (2016). Theoretical kinetics study of thymine tautomerism and interaction of Na with its tautomers. Molecular Physics, 118, 1-19.

[3] Korkani, Z., & Ramazani, Z. (2024). Dynamics of spontaneous mutations: implications of guanine–cytosine tautomers on chromatin integrity, Molecular Physics, e2396539.



بارگذاری داروی متوتر کسات بر بستر نانولولهی بورنیتریدی اصلاح سطحی شده: مطالعه شبیهسازی دینامیک مولکولی

لیلا توحیدی فر ^۱، محمدحسین کوثری^{۲، *}، سبا رضایی^۳

^۱ محقق پسادکتری، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، I.tohidifar@iasbs.ac.ir mhkowsari@iasbs.ac.ir ^{۱»} دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، sabarezaey@iasbs.ac.ir ۲ دانشجوی کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، sabarezaey@iasbs.ac.ir

واژگان كليدى: دارورسانى هدفمند، نانولولەى بورنيتريدى، پليمر كيتوسان، متوتركسات، ديناميك مولكولى

۱– مقدمه

از موضوعهای مهم در زمینهی داروهای ضدسرطان، دارورسانی هدفمند به بافت موردنظر در بدن است که برای این منظور از نانوحاملهای دارویی استفاده میشود که به سوی بافت آسیب دیده حرکت میکنند. نانولولههای بورنیتریدی (BNNTs) به دلیل ویژگیهای منحصر به فرد خود از جمله پایداری بالای شیمیایی و گرمایی، نسبت سطح به حجم بالا و زیستسازگاری به عنوان نانوحاملهای موثر دارویی شناخته شدهاند. همچنین، برای اصلاح سطح نانولولهها از پلیمر کیتوسان (CS) استفاده میشود که علاوه بر افزایش حلالیت نانولولههای بورنیتریدی، میتواند به عنوان عاملی حساس به HT در رهانمودن دارو مجاور سلولهای هدف نقش موثری ایفا نماید (Sourt المولههای بورنیتریدی، میتواند به عنوان عاملی حساس به HT در رهانمودن دارو مجاور سلولهای سامانههای دارورسانی کارآمد به شمار میروند که بر اساس ساختار نانولولههای بورنیتریدی و قابلیت بارگذاری داروها در فضای داخلی و خارجی آنها، توجه به جزییات الگوی بارگذاری داروها ضروری به نظر میرسد. در این کار تحقیقاتی بر فرآیند بارگذاری داروی ضدسرطان متوتر کسات (MTX) روی سطح خارجی نانولولههای بورنیتریدی اصلاح سطحی شده با پلیمر کیتوسان یا مروس شده در فضای داخلی نانولوله با روش شبیهسازی دینامیک مولکولی تمرکز شده است کار تحقیقاتی بر فرآیند بارگذاری داروی ضدسرطان متوتر کسات (MTX) روی سطح خارجی نانولوله و بورنیتریدی اصلاح سطحی شده با پلیمر کیتوسان یا

۲- روش

ساختار نانولولهی بورنیتریدی از نوع دستهصندلی با مولفههای کایرالیته (۱۲و۱۲) و طول ۵۰ آنگستروم به کمک نرمافزار N-aceyl-D طراحی شد. دو زنجیرکیتوسان متشکل از پانزده مونومر D-glucosamine (GCS) و -D-glucosamine (ACG) و -N-aceyl (NAG) و Glucosamine (NAG)، توسط نرمافزار AmberTools17 ساخته شد. در مورد داروی متوترکسات نیز از ساختار بلورنگاری دریافتشده از پایگاه بانک داده پروتئین با علامت اختصاری IDDS، استفاده شد. میدان نیروی GROMOS54a7 جهت توصیف برهم کنشهای بین اجزای سامانه استفاده شد. مولکولهای آب نیز با پتانسیل TIP3P در نظر گرفته شدند. تمامی شبیهسازیها توسط نرمافزار گرومکس نسخهی ۵۰۰.۴ (Abraham) پیش رفتند. در گام اول، زنجیرهای پلیمر در دو طرف نانولوله قرار داده شدند و ساختار حاصل توسط مولکولهای آب و یون احاطه شد. پس از مراحل به تعادلرسانی و اصلاح سطح نانولوله با دو زنجیر پلیمر، اجرای اصلی به مدت ۱۵۰ نانوثانیه در دمای ۳۱۰ و فشار ۱ اتمسفر صورت گرفت. در گام دوم، از ساختار نهایی گام نخست جهت بارگذاری پانزده مولکول داروی متوترکسات بر بستر آن به دو صورت استفاده شد. در یک سامانه، پانزده مولکول روی سطح خارجی نانوحامل در فاصله حدود ۱۰ آنگستروم از آن قرار داده شدند و در سامانه دیگر، سه مولکول دارو در فضای داخلی (کپسوله شده) و دوازده مولکول روی سطح خارجی نانوحامل قرار گرفتند. مراحل شبیهسازی در این گام نیز همانند گام اول پیش رفت و مسیر تحول سامانهها با گذشت زمان مطالعه گردید.

دانيكاه اصفيان ٢٩ و ٣٠ باران ١٤٠٣

۳- بحث و نتیجهگیری

جهت بررسی پایداری داروی بارگذاری شدهی متوتر کسات بر بستر نانولولهی بورنیتریدی اصلاح سطحی شده با کیتوسان در دو سامانه، از کمیت ریشه میانگین مربع انحراف (RMSD)، استفاده شد. قسمت (الف) شکل ۱ نشان می دهد که پس از گذشت حدود ۲۵ نانوثانیه از شروع شبیه سازی، نوسان های حاصل از تغییر این کمیت در هر دو سامانه، کاهش چشم گیری داشته است که نشان از پایداری فرآیند بارگذاری مولکول های دارو بر بستر نانوحامل دارد. علاوه بر آن، مقدار میانگین و تغییر RMSD برای سامانه شامل سه مولکول داروهای کپسوله شده در مقایسه با سامانه دیگر کمتر است که میتواند بارگذاری و جذب موثرتر داروی موترکسات در فضای داخلی نانوحامل و در نتیجه پایداری بیشتر این سامانه را پیش بینی نماید. به نظر می رسد داروهای محصور در فضای داخلی نانولوله تحرک کمتری داشته و در پایداری و کیفیت جذب دارو تاثیر گذار باشند.



شکل ۱ : (الف) تغییر ریشه میانگین مربع انحراف (RMSD) مولکولهای متوترکسات با گذشت زمان شبیهسازی، (ب) انرژی پتانسیل برهمکنش بینمولکولی میان اجزای تشکیل دهنده سامانههای دارورسانی موردنظر به تفکیک سهم کولنی و واندروالسی.

نتایج حاصل از محاسبه انرژی پتانسیل کل برهم کنش بین مولکولی میان اجزای سامانه به همراه تفکیک سهم کولنی و واندروالسی در قسمت (ب) شکل ۱ آورده شدهاست. مقادیر منفی نشان از تمایل مولکولهای دارو به جذب بر بستر نانوحامل دارند که سهم نیروهای واندروالسی در برهم کنشهای دارو-نانولوله/کیتوسان به عنوان سهم غالب شناخته شدهاند. سهم برهم-کنشهای بین مولکولی میان مولکولهای دارو و نانوحامل در حالت کپسوله شده افزایش می یابد. شبیه سازی کنونی نشان می دهد که محصور شدن مولکولهای دارو در فضای داخلی نانولوله، میزان تماس میان دارو و نانوحامل را افزایش داده و بارگذاری همزمان دارو در فضای داخلی و بستر خارجی نانولوله میتواند به عنوان الگوی پایدارتر و موثرتر جهت بارگذاری مولکولهای دارو بر بستر نانوحامل موردنظر معرفی شود.



منابع و مراجع

[1] Kakarla, A. B., & Kong, I. (**2022**). In vitro and In vivo cytotoxicity of boron nitride nanotubes: A systematic review. Nanomaterials, 12(12), 2069-2110.

[2] Abraham, M. J., van der Spoel, D., Lindahl, E., Hess, B., and the GROMACS development team, (2014). GROMACS User Manual version 5.0.4.



شبیهسازی دینامیک مولکولی حلالهای اوتکتیک عمیق سبز بر پایه کولین و مشتقهای آن با اوره

فاطمه فتاحی'، محمدحسین کوثری'^{، *}

^۱ دانشجوی دکتری، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، f.fattahi@iasbs.ac.ir ^{۳،۴} دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، mhkowsari@iasbs.ac.ir

واژگان كليدى: حلال هاى اوتكتيك عميق، پيوند هيدروژنى، كولين كلريد، ديناميك مولكولى

۱– مقدمه

حلالهای اوتکتیک عمیق یا حلالهای فرا زودگداز نسل جدیدی از حلالها هستند که از یک گونهی دهندهی پیوند هیدروژنی (HBD) و یک پذیرنده پیوند هیدروژنی (HBA) در نسبتهای مشخص تهیه می شوند. متداول ترین حلالهای اوتکتیک عمیق از مخلوط نمکهای آمونیومی نوع چهارم نظیر کولین کلرید با موادی با قابلیت دهندگی پیوند هیدروژنی مانند اوره ایجاد می شوند. از خواص این حلالهای سبز می توان به نقطه ذوب کم و فشار بخار ناچیز، سادگی تهیه و قیمت مناسب، کارایی مطلوب در فرآیندهای جذب و جداسازی گاز و همچنین قابلیت تنظیم پذیری خواص در اثر تغییر در ساختار و نسبت گونهها اشاره کرد. بررسیهای اخیر نشان می دهد که حلالهای اوتکتیک عمیق بر پایه کولین کلرید از کارآمدترین سامانههای سبز برای جذب گازها هستند (Arazarina) نشان می دهد که حلالهای اوتکتیک عمیق بر پایه کولین کلرید از کارآمدترین سامانههای سبز برای جذب اوره با آنیون کلرید ایجاد می شود. تمایل برای تشکیل پیوندهای هیدروژنی قوی بین کاتیون کولین و مولکول انرژی، نوعی نظم ساختاری موضعی را نتیجه می دهد. بسته به نوع و نسبت گونههای سازنده ی حلالهای اوتکتیک عمیق مختلف میزان فضای آزاد بین گونهها نیز متفاوت بوده که در نهایت منجر به رفتار و کارآیی متفاوت این حلالهای اوتکتیک عمیق مختلف، میزان فضای آزاد بین گونهها نیز متفاوت بوده که در نهایت منجر به رفتار و کارایی متفاوت این حلالها می شود. در این کار میزان فضای آزاد بین گونهها نیز متفاوت بوده که در نهایت منجر به رفتار و کارایی متفاوت این حلالها می شود. در این کار و میزان غطی ای استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، به بررسی خواص دینامیکی، میزان حجم آزاد سامانه و رفتار حلالهای و تکتیک عمیق بر پایه کولین کلرید و مشتوهای آن با اوره پرداخته شده است.

۲- روش

شبیه سازی های دینامیک مولکولی برای سه سامانه ی حلال اوتکتیک عمیق با کاتیون ها و نسبت های مولی متفاوت نمک به اوره مشخص شده در قسمت (ب) شکل ۱ انجام شده است. سامانه های شبیه سازی شامل کاتیون های تری متیل-(۲-هیدروکسی-اتیل) آمونیوم، دی متیل-دی(۲-هیدروکسی اتیل) آمونیوم و متیل-تری(۲-هیدروکسی اتیل) آمونیوم و آنیون کلرید همراه با اوره در جعبه های مکعبی به ترتیب به طول ۵۶، ۴۶ و ۵۶ آنگستروم طراحی شده است. هر سامانه شامل ۲۵۶ مولکول از گونه های کاتیون، آنیون و نسبت مولی (۱:۱) یا (۱:۲) مشخص شده از مولکول اوره در شکل ۱ است که با استفاده از بسته نرمافزاری LAMMPS نسخه ۲۰۲۱ (Thompson، ۲۰۲۱) در مجموعه آماری NVE شبیه سازی شده است. ساختارهای بهینه شده ای از هر یک از گونه های موجود در سامانه با نرم افزار پکمول در جهات مختلف فضا تکرار شد. پارامترهای پتانسیل از میدان نیروی بر پایه امبر گزارش شده توسط لوپز-پادوآ و همکاران (CL&P) استخراج شده است. در تمام شبیه سازی ها از الگوریتم جهش قورباغهای استفاده و طول گام زمانی یک فمتو ثانیه انتخاب شد. شعاع قطع پتانسیل جفتی۱۲ آنگستروم در نظر گرفته شد و برای تعیین برهم کنشهای الکتروستاتیک کولنی از روش جمع اوالد استفاده شد. پس از مراحل به تعادل رسانی، اجراهای اصلی به مدت ۴۰ نانوثانیه در دمای ۳۵۳/۱۵ کلوین و فشار ۱ اتمسفر برای محاسبه خواص ساختاری و خواص دینامیکی قرار داده شد.

الكاداصفيان ٢٩ و.٣٠ بالان ١٤٠٣

۳- بحث و نتیجه گیری

حلالهای اوتکتیک عمیق دارای گرانروی به نسبت بالایی هستند و وجود شبکه پیوند هیدروژنی پیوسته در این حلالها منجر به کاهش تحرک گونهها درون سامانه میشود. در قسمت (الف) شکل ۱، نمودار تابع میانگین مربع جابجایی (MSD) برای مراکز جرم گونههای موجود در سه سامانه حلال اوتکتیک عمیق مورد مطالعه نسبت به زمان ترسیمشده است. شیب تابع برای هر گونه با ضریب خودنفوذی آن در سامانه متناسب است. همانطور که مشاهده میشود با جایگزینی گروههای ۲-هیدروکسیاتیل به جای متیل (افزایش تعداد زنجیرهای CH2CH2OH) در ساختار کاتیون مشتق کولین این سامانهها، شیب نمودار میانگین مربع جابجایی مربوط به گونههای تشکیل دهنده حلال کاهش می یابد که می تواند با توجه به تعداد گروههای ۲-هیدروکسیاتیل و در نتیجه تقویت برهم کنشهای بین مولکولی و شبکه پیوند هیدروژنی قویتر بین گونهها توضیح داده شود. در این سامانهها بیشترین دینامیک مربوط به مولکول اوره است که با توجه به ماهیت مولکولی آن نسبت به کاتیون و آنیون مورد انتظار است. آنیون کوچک کلرید، چگالی بار سطحی زیادی دارد و مطالعات ساختاری و پیوند هیدروژنی در این سامانهها، همبستگی ساختاری زیاد و تشکیل پیوند هیدروژنی بسیار قوی بین آنیون کلرید و گروههای هیدروکنی راین سامانهها، همبستگی ساختاری زیاد و تشکیل پیوند هیدروژنی بسیار قوی بین آنیون کلرید و گروههای هیدروکسیل کاتیون را نشان می دهد و حرکت انتقالی مری و نیون دارد. در تمامی سامانهها، دینامیک و خودنفوذی کاتیون نسبت به دو گونه دیگر پایینتر بوده است که مری واند ناشی از حجم و جرم مولی بیشتر کاتیون و حضور گروههای هیدروکسیل باشانه می دود و است که



شکل ۱ : (الف) تغییرات میانگین مربع جابجایی (MSD) برای مراکز جرم گونههای موجود در سامانههای حلال اوتکتیک عمیق با گذشت زمان شبیهسازی، (ب) ساختار اجزای تشکیلدهنده سامانههای حلال اوتکتیک عمیق و نسبتهای مولی اجزای سازنده.

در ادامه این فعالیت پژوهشی به بررسی خواص جذب فیزیکی گازهای اسیدی کربن دیاکسید و هیدروژن سولفید در این حلال ها پرداخته خواهد شد. نتایج اولیه شبیه سازی نشان میدهد که در توافق با گزارشهای تجربی، با افزایش تعداد گروههای ۲-هیدروکسیاتیل، جذب فیزیکی گازهای اسیدی در این سامانهها افزایش مییابد. بررسی جزییات ساختاری، دینامیکی و ترمودینامیکی سامانههای مخلوط حلال با گاز مورد نظر است.



منابع و مراجع

Kazarina, O. V., Agieienko, V. N. (2021). Deep eutectic solvents composed of urea and new salts of a choline family for efficient ammonia absorption. Journal of Chemical & Engineering Data, 67, 138-150.
 Thompson, A. P., et al. (2022). LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. Computer Physics Communications, 271, 108171.

امکان استفاده از Calix[4]pyrrol بعنوان اند باتری های یون لیتیم، سدیم

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳

وپتاسيم

الهام گراوندتبار'،حميدرضاشاملويي آ*، زينب بيگلري ً .

shamlouei@gmail.com ا-نویسنده مسئول: دانشیار،شیمی فیزیک ،گروه شیمی ،دانشکده شیمی و دانشگا لرستان ۲- دانشجوی دکتری ،شیمی فیزیک،شیمی،دانشکده شیمی ودانشگاه لرستان elhamtabar540@yahoo.com ۳- دانشیار،شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی و دانشگاه لرستان،biglari@gmail.com

واژگان کلیدی: کالیکس[۴] پیرول،باتری های لیتیم،سدیم وپتاسیم

۱- مقدم

باتری های یون سدیم بدلیل چگالی بالا، ایمنی بالاوهزینه پایین توجه بسیاری رابرای دخیره انرژی به خودجلب کرده است.قابل پیش بینی است که ممکن است جایگزین مناسبی برای باتری های یون لیتیمی باشند [۱]مواد اندی نانوساختارها که درقلب تحقیقات دستگاههای ذخیره کننده انرژی که نیازمندسرعت وایمنی بالا هستند قراردارند. بنابراین شناسایی مواد مناسباند برای باتریهای یون سدیم ضروری است. برای دستیابی به مواد مناسباند، نانوساختارهای سه بعدی مطلوب میباشند. مولکول هایی مانند کالیکس ارن،کالیکس پیرول، ساختارسه بعدی و سخت دارند.حفره داخلی این مولکول ها بهراحتی میتوانند اتمها ویون ها رادرخود نگهدارند که تبدیل به گیرندههای مهم درنانوتکنولوژی، مولکول های زیستی میشوند [۲].دراین تحقیق ما کاربرد احتمالی بررسی میکنیم.

۲-روش

بهینهسازی ساختارها و محاسبات انرژی درسطح تئوری B3LYP/6-311G(d,p) بامحاسبات تابع دانسیته چگالی با استفاده ازبرنامه گوسین ۰۹ انجام شد.اگر کالیکس [۴]پیرول رایک اند درباتری های یون لیتیم،سدیم وپتاسیم فرض کنیم،واکنش ها درکاتدواندرامی توان بصورت زیرنوشت:

(۱) :کاتد

Li/Na,K

Li/ Na and K @ calix[4] pyrol \leftrightarrow Li⁺/ Na⁺ and K⁺ @calix[4] pyrrol +e⁻ (۲) کاتد (۲)

همچنین ولتاژسلول رامی توان با استفاده ازمعادله نرنست بصورت محاسبه کرد. (۳)

 $V_{Cell} = -\Delta G_{Cell}/ZF$



Structures	Eg	Vcell(CAM-B3LYP)
Calix[4]pyridine	۸.۳۷	
Li@[4]calixpirol2	٣	۲.۶۵
Li ⁺ @calix[4]pyrrol	۶.۸۴	
Na@calix[4] pyrol	۳.۴۲	۲.۴۹
Na ⁺ @calix[4] pyrrol	۷.• ۷	
K@calix[4] pyrrol	۲.۷۵	۱.۵۸
K ⁺ @calix[4] pyrrol	۶.۹۸	

جدول۱: انرژی گپ وولتاژسلول مولکول های طراحی شده

نتایج جدول ۱نشان میدهدکه انرژی گپ درحضور اتمها ویونها نسبت به ساختار اولیه کاهش یافته است که موجب افزایش رسانایی میشود. باتوجه به مقدار بالای ولتاژ سلول میتوان دریافت که ساختارکالیکس بهخوبی می تواند نقش اندرا در باتری یون سدیمی ایفا کند.

۳-نتیجهگیری

دراین تحقیق،محاسبات تابع دانسیته چگالی برای تاییدامکان استفاده از کالیکس[4]پیرول انجام شد.نتایج نشان داد که انرژی گپ محاسبه شده برای گونههای اتمی و یونی فلزهای لیتیم، سدیم و پتاسیم نسبت به ساختار اولیه کاهش یافته است که این مقدار کاهش برای گونههای اتمی بسیار بیشتر از یونی است. این نشان میدهد که رسانای الکتریکی کالیکس [4]پیرول در حضوراتمهای فلزات نامبرده بیشتراست. مقادیر ولتاژ سلول به عنوان اند باتریهای یون لیتیم، سدیم و پتاسیم با روش -CAM B3LY محاسبه شد. نتایج حاکی ازان است که سدیم به دلیل سمیت کمتر و در دسترس بودن در کنار کالیکس[4]پیرول میتوانند به عنوان اند جایگزینی برای باتریهای لیتیومی باشند.

منابع

A. Soltani, A. Ahmadi Peyghan, Z. Bagheri, H2O2 adsorption on the BN and SiC
 S.B. Nimse, T. Kim, Biological applications of functionalized calixarenes, Chem. Soc. Rev. 42 (2013) 366–386.



مقایسه جذب لیتیوم و منیزیم بر روی اکسیدهای فلزی با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

آمنه گنجی راد'، مریم حیدری دوکوهکی'، امین رضا ذوالقدر *"

ا و*:دانشجوی دکتری تخصصی، شیمی فیزیک، بخش شیمی، دانشکده علوم دانشگاه شیراز، (ameneh.ganjirad@gmail.com) ۲- دکتری تخصصی، شیمی فیزیک، بخش شیمی، دانشکده علوم دانشگاه شیراز، (maryamhdi5844@gmail.com) ۳ پروفسور، شیمی فیزیک، بخش شیمی، دانشکده علوم دانشگاه شیراز، (arzolghadr@shirazu.ac.ir)

واژگان كليدى: شبيه سازى ديناميك مولكولى، جذب سطحى، ليتيوم، اكسيد فلزى

۱– مقدمه

لیتیوم یک فلز ارزشمند است که به دلیل کاربرد فعلی آن در بخش ذخیره انرژی، باتریهای لیتیوم یونی و استفاده بالقوه آن در همجوشی گرما هستهای به طور گسترده شناخته شده است. انتظار می رود با گسترش روزافزون وسایل نقلیه الکتریکی در سراسر جهان تقاضا برای لیتیوم (Li) به شدت افزایش یابد و پیش بینی می شود که قیمت ها همچنان افزایش یابد. لیتیوم می تواند به طور پایدار از آب تولید شده نفت و گاز با استفاده از فناوری های بازیابی لیتیوم مانند جاذب ها، فرآیندهای مبتنی بر غشاء و سیستم های مبتنی بر الکترولیز بازیابی شود (۲۰۱۷، ۲۰۱۷). با توجه به اینکه در فرایند استخراج لیتیوم، یونهای منیزیم بصورت یون مزاحم اثرگذار هستند مطالعات گذشته به دنبال روش هایی برای حذف این یونهای مزاحم بوده اند. در مطالعه حاضر، بررسی مکانیزم جذب رقابتی لیتیوم نسبت به منیزیم بر روی سطوح جامد متشکل از اکسیدهای فلزی با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی انجام گرفته است.

۲- روش

در این مطالعه، محلول های آبی لیتیوم کلرید و منیزیم کلرید به نسبت یک به یک بین سطوح جامد MnO2 و TiO2 قرار گرفته و ساختار و دینامیک این سیستم ها با هم مقایسه گردید. آنالیز و تحلیل داده های حاصل از شبیه سازی دینامیک ملکولی پس از حصول تعادل، بر پایه روش ها و روابط ترمودینامیک آماری مورد بررسی قرار گرفت. شبیهسازی ها با استفاده از نرم افزار گرومکس و به کمک مجموعه NVT (مجموعه هم حجم- هم دما) صورت گرفته است که در آن تعداد ذرات (N)، حجم (V) و دما (T) ثابت است. در این مطالعات دمای سیستم ها ۲۹۸ کلوین و شعاع قطع ۱.۲ نانومتر لحاظ گردید. مدت زمان شبیه سازی ها طی مراحل تعادل رسانی ۱۰ نانوثانیه و مراحل نهایی ۲۰ نانوثانیه بوده است. آنالیز و تحلیل داده ها بر پایه روش ها و روابط ترمودینامیک آماری از جمله تابع توزیع شعاعی، چگالی عددی، ضرایب نفوذ و عدد کئوردیناسیون مورد بررسی قرار گرفت.



شکل ۲ : چگالی عددی اجزای محلول های شبیه سازی شده بین سطوح جامد

شکل ۳ تابع توزیع شعاعی حاصل از شبیهسازی برای یون های لیتیوم، منیزیم، کلرید و آب را با سطوح نشان می دهد. همانطور که مشاهده میشود محتمل ترین پیک برای لیتیوم در فاصله ۰/۱۴ nm ۱۰/۰ ظاهر میشود. طبق شکل یونهای منیزیم برهمکنش بسیار ضعیفی با سطوح جامد دارند.



در این مطالعه جهت بررسی میزان حلالپوشی یونها و اثر آن بر فرایند جذب، عدد کئوردیناسیون محاسبه گردید که که با توجه به جدول ۱، حلال پوشی لیتیوم از منیزیم کمتر است، یعنی لیتیوم آزاد تر از منیزیم است که نشان می دهد لیتیوم به خوبی توسط سطوح MnO₂ و TiO جذب می شود.

سيستم	Li-OW	Mg-OW				
TiO ₂ -Li-Mg 1:1	2.6210	3.9220				
MnO ₂ - Li-Mg 1:1	2.9959	5.9572				

جدول ۱: عدد کئوردیناسیون

۴- نتیجهگیری

نتایج حاصل از شبیهسازی دینامیک مولکولی جذب سطحی محلول های آبی حاوی یونهای لیتیوم و منیزیم بر روی سطوح جامد اکسید فلزی MnO₂ و TiO2 نشان داد که در فرایند جذب سطحی یون های لیتیوم برهم کنش بیشتری با سطح جامد دارند و با توزیع بیشتری بر روی این سطوح قرار می *گ*یرند. طی فرایند جذب یون های منیزیم به دلیل حلالپوشی بیشتر تمایل کمتری به قرار گیری روی سطح داشته و در رقابت با لیتیوم کمتر جذب سطح شدند.

منابع و مراجع

[1] Martin, G., Rentsch, L., Höck, M., & Bertau, M. (2017). Lithium market research – global supply, future demand and price development. Energy Storage Materials, 6(1), 171–179.



داسگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

نازنین لقمانی^{۱۱}*، حسین فرخپور ^۲ ۱ - کارشناسی ارشد، شیمی (شیمی-فیزیک)، گروه شیمی-فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان، loghmaninazanin@gmail.com

۲- استاد، شیمی (شیمی-فیزیک)، گروه شیمی-فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان، h-farrokh@iut.ac.ir

واژگان كليدى: دىپپتيد، مكانيسم قطعه قطعه شدن، انرژى فعالسازى، كاتيون سديم و ليتيوم، DFT

۱– مقدمه

یافتن منشا حیات همواره یکی از چالشهای اساسی بشر بوده است و بهدست آوردن اطلاعات در این راستا با پیشرفت روزافزون علم و تکنولوژی تسهیل مییابد. یکی از فرایندهای مهم آنزیمی در بدن موجودات زنده قیچی شدن پروتئینهاست. پروتیومیکس یک روش اساسی تجربی برای بررسی نحوه قطعه قطعه شدن پروتئینها به واحدهای کوچکتر و بررسی عملکرد پروتئینها و پپتیدها، با استفاده از بهدست آوردن توالی آمینواسید تشکیلدهنده آنهاست. علی رغم این که مکانیسمهای متعددی برای قطعه قطعه شدن پروتئینها و پپتیدها در حضور کاتیونهای فلزی با استفاده از روش پروتئومیکس ارائه شده ولی هیچگونه محاسبات نظری و مطالعات تجربی بر روی انرژیهای فعالسازی مراحل مختلف این مکانیسمها در مقالات وجود ندارد. از طرف دیگر هیچ اطلاعات اساسی درمورد نقش نوع کاتیون فلزی در گسست پیوندهای پپتیدی در فرایند پروتئومیکس در منابع وجود ندارد. لذا مطالعه و بدست آوردن اطلاعات کافی در حیطه سینتیک این مکانیسم در حوضه بیولوژی اطلاعات ارزشمندی را در رابطه با شکست پیوندهای پپتیدی در فاز گازی ارائه میدهد. یکی از مهمترین و قابل استنادترین مکانیسمها برای قطعه شدن پپتیدهای کوچک در حضور کاتیونهای فلزی در شان داده شده است که در راستای وجود ندارد. از طرف دیگر هیچ شکست پیوندهای پپتیدی در فاز گازی ارائه میدهد. یکی از مهمترین و قابل استنادترین مکانیسمها برای قطعه قطعه شدن زیست شناسان و محققان نیز قرار گرفته است [1,2].



شکل ۱: مکانیسم قطعه قطعه شدن پپتیدها در حضور کاتیون فلزقلیایی

در این مکانیسم دو مرحلهای پیوند پپتیدی در حضور کاتیونهای فلزات قلیایی مانند لیتیوم و یون سدیم گسسته شده و پتیدی با یک آمینواسید کوچکتر حاصل میشود. در این پژوهش محاسبات سینتیکی و انرژیتیک مربوط به مکانیسم قطعه قطعه شدن پپتید برای چهار دیپپتید تیروزین-آلانین، فنیلآلانین-آلانین، آلانین-فنیلآلانین و آلانین-گلوتامین در فاز گازی در حضور کاتیونهای لیتیوم و سدیم بهطور جداگانه صورت گرفته است.

داستگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

۲- روش محاسباتی

در این پژوهش از روش تابعی چگالی (DFT) با به کارگیری تابعی B3LYP-D3 و مجموعه پایه (DFT)++G(d,p) استفاده شده است. ساختارهای حالت گذار با استفاده از محاسبات opt=TS و ساختارهای واکنش دهندهها و محصولات نیز از نظر انرژی بهینه شدهاند. همچنین برای تفسیر و بررسی نتایج، از محاسبات اتمها در مولکولها (AIM) و اوربیتالهای پیوندی طبیعی (NBO) نیز استفاده شده است.

۳- نتایج و بحث

به عنوان نمونه، نمودار انرژی پتانسیل ساختارهای بهینه (واکنشدهنده، حالتگذار و محصول) در مکانیسم قطعه قطعه شدن تیروزین-آلانین در حضور کاتیون فلز قلیایی سدیم مطابق با شکل ۲ بهدست آمده و انرژی فعالسازی و ثابت سرعت برای هر مرحله از مکانیسم محاسبه شده است.



شکل ۲: نمودار انرژی پتانسیل ساختارهای بهینه مکانیسم قطعه قطعه شدن +Tyr-Ala-Na

۴– نتیجه گیری

انرژی فعالسازی و ثابتهای سرعت برای هر دو مرحله از مکانیسم قطعه قطعه شدن دیپپتیدها نشان میدهد که وابستگی انرژی فعالسازی مرحله اول و دوم مکانیسم به نوع آمینواسیدهای شرکت کننده در ساختار دیپپتید است. محاسبات نشان داد که در غیاب کاتیون فلزی، انرژی فعالسازی مرحله اول و دوم مکانیسم به نحو قابل توجهی افزایش مییابد.

منابع و مراجع

[1] Schalley, C. A., Springer, A. (2009). Mass Spectrometry of Non-Covalent Complexes: Supramolecular Chemistry in the Gas Phase. Germany: Wiley.

[2] Richard P. Grese, Ronald L. Cerny, and Michael L. Gross (1989). Metal ion-peptide interactions in the gas phase: a tandem mass spectrometry study of alkali metal cationized peptides.



شکل ۱ : نانومواد براساس ابعاد

دنیای صنعتی امروز و پیشرفتهای شگرفی که سبک زندگی انسان را تسهیل کردهاست، اما بیتردید در حل مشکلات بشری دارای کاستیها و چالشهایی است. همانطور که غلظت گاز کربن دی اکسید در جو با توسعه فعالیتهای صنعتی افزایش یافته است. از سوی دیگر، به دلیل افزایش تقاضای انرژی، استفاده از سوختهای فسیلی چند برابر شده است. آلودگی ناشی از این گاز سلامت انسان را به طور جدی به خطر انداخته و باعث تغییرات آب و هوایی سریع شده است از این رو، حامیان و محققان محیط زیست برای حل این مشکلات تحقیقات زیادی انجام دادهاند. یکی از رایج ترین راه حلها، جذب گاز کربن دی اکسید و به دام انداختن آن توسط مواد دیگر است.(Oschatz 2018)

دانگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳

۲- بحث و روش

هتروبایلایرها، ساختارهای دو بعدی هستند که از دو تک لایه مختلف بدست می آیند؛ در آن ها تک لایهها با خواص الکترونی متفاوت به یکدیگر متصل شده اند.در سال ۲۰۱۰، دین و همکارانش اولین ساختارهای ناهمسان نازک اتمی دو بعدی را معرفی کرد. هتروبایلایر شدن باعث ایجاد مواد جدید و ویژگیهای جدید می شود که یکی از مهمترین ویژگیهای الکترونی و تفاوت مقدار گاف انرژی در ساختار نهایی نسبت به تک لایههای سازنده است. در این مقاله بررسی جذب گاز کربن دی اکسید برروی هتروبایلایر GBS2 که توسط (Jalili and Pakzadiya) معرفی شد؛ انجام گرفت.



شکل ۲ : ساختار هتروبایلایر GBS2 تشکیل شده از دو صفحه بوروفن BS2 و گرافداین

تمام محاسبات این پژوهش در قالب روش تئوری تابعی چگالی با کمک از بسته نرمافزاری کوانتوم اسپرسو انجام شده و به منظور بسط تابع موج الکترونی از مجموعه پایه موج تخت استفاده شد. از شبه پتانسیل خیلی نرم برای جایگزینی برهمکنشهای واقعی الکترون-یون و از تقریب گرادیان شیب تعمیم یافته با استفاده از تابعی PBE برای تقریب و اعمال اثرات تبادلی-همبستگی الکترونها استفاده شد. به منظور محاسبه دقیق انرژی برای برهمکنشهای ضعیف واندروالسی از روش DFT-D2 با فرمول بندی گریم اعمال گردید. پس از نشان دادن گاز کربن دی اکسید در موقعیتهای مختلف بر روی ساختار و و بهینه سازی ساختار، مقدار انرژی جذب را میتوان طبق معادلهی (۱) محاسبه نمود.

 $E_{ads} = E_{adsorbent/adsorbate} - (E_{adsorbate} + E_{adsorbent})$

(۱)

جدول ۱ : مقایسهی بهترین انرژی جذب سه ساختار گرافداین، بوروفن BS2 و هتروبایلایر GBS2

بهترین انرژی جذب (ev)	نام ساختار
-•.1111428878	گرافداین
-•.1641844.44	بوروفن BS2
-•.189714•788	هتروبايلاير GBS2

۳-نتیجه گیری

پس از انجام محاسبات بر روی ساختارهای گرافداین، بوروفن BS2 و ساختار هتروبایلایر GBS2 و محاسبه بهترین انرژی جذب برای هر یک از ساختارها؛ میتوان نتیجه گرفت جذب بر روی ساختار هتروبایلایر شده بیشتر از دو ساختار مونولایر تشکیل دهنده آن میباشد و هتروبایلایر شدن این دو ساختار ویژگی جذب گاز کربن دی اکسید را بهبود بخشیده است.

منابع و مراجع

- Buzea, Cristina, et al. "Nanomaterials and Nanoparticles: Sources and Toxicity." *Biointerphases*, vol. 2, no. 4, 2007, pp. MR17–71.
- [2] Cao, Guozhong. Nanostructures & Nanomaterials: Synthesis, Properties & Applications. Imperial college press, 2004.
- [3] Jalili, Seifollah, and Atena Pakzadiyan. "Investigation of Structural, Electronic and Thermoelectric Properties of Two-Dimensional Graphdiyne/Borophene Monolayers and Hetero-Bilayers." *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 34, no. 12, 2022, p. 125501.
- [4] Oschatz, Martin, and Markus Antonietti. "A Search for Selectivity to Enable CO 2 Capture with Porous Adsorbents." *Energy & Environmental Science*, vol. 11, no. 1, 2018, pp. 57–70.
- [5] Roduner, Emil. "Size Matters: Why Nanomaterials Are Different." *Chemical Society Reviews*, vol. 35, no. 7, 2006, pp. 583–92.


امکان سنجی ذخیره سازی هیدروژن بر روی ساختار B₁₂P₁₂ تزیین شده با کلسیم : مطالعه نظری بر پایه DFT

ثمین محمدی قشلاق^۱ ، آیدین بهرامی ^{۱*}

۱ : شیمی محض ، دانشکده شیمی ، دانشگاه ارومیه ، ما معنی ، دانشگاه ارومیه ، ai.bahrami@urmia.ac.ir ، * : استادیار ، شیمی فیزیک ، گروه شیمی فیزیک ، دانشکده شیمی ، دانشگاه ارومیه ،

DFT ، $B_{12}P_{12}$ ، تزيين كلسيم $B_{12}P_{12}$ ، $B_{12}P_{12}$) واژگان كليدى: ذخيره سازى هيدروژن

۱– مقدمه

در دنیای امروز، افزایش جمعیت و به دنبال آن افزایش نیاز به سوخت های فسیلی، پژوهشگران را ترغیب به تحقیق و ارائه راهکارهایی می کند که تا حد امکان وابستگی به سوخت های فسیلی کاهش یاید. در این میان هیدروژن جزء بهترین گزینه هایی است که به خاطر فراوانی، در دسترس بودن و چگالی انرژی بالا می تواند جایگزین امیدوار کننده ای برای سوخت های فسیلی باشد (۳–۱). هدف از انجام پژوهش پیش رو این بوده است که ساختار B₁₂P₁₂ تزیین شده با کلسیم به عنوان یک ساختار بالقوه برای ذخیره سازی هیدروژن مورد بررسی قرار بگیرد.

۲- روش

تمام محاسبات نظریه تابعیت چگالی روی خواص هندسی و الکترونی با استفاده از نرم افزار Dmol³ و روش PBE با توابع پایه +DNP صورت گرفته است . برای سایر آنالیز ها نیز از برنامه Gaussian 09 استفاده شده است. میانگین انرژی جذب مولکول های هیدروژن جذب شده با استفاده از رابطه (۱) محاسبه می شود :

$$E_{ads} = -\frac{1}{n} E[B_{12}P_{12}Ca.(H_2)_n] - nE(H_2) - E(B_{12}P_{12}Ca)$$
(1)

که در آن n تعداد مولکول های هیدروژن، $E[B_{12}P_{12}Ca.(H_2)n]$ انرژی کل ساختار تزیین شده با کلسیم با تعداد هیدروژن های جذب شده ، (H_2) انرژی کل مولکول هیدروژن و $(B_{12}P_{12}Ca)$ انرژی ساختار با تزیین یک کلسیم میباشد. درصد چگالی وزنی برای هر ساختار از معادله (۲) به دست میآید : (T)

$$M_g = 100 \times \frac{nM_{H2}}{M_{B12P12} + M_{Ca} + nM_{H2}}$$

که در آن M_{H2} ، M_{H2} و M_{Ca} و M_{Ca} به ترتیب نشان دهنده جرم اتمی مولکول هیدروژن ، ساختار پایه و کلسیم است.

۳- بحث و نتیجه گیری

ساختار B₁₂P₁₂ دارای ۶ حلقه چهارعضوی و ۸ حلقه شش عضوی میباشد. در ابتدا ساختار اولیه بهینهسازی شده و سپس با شناسایی حلقههای پایدار ، ساختار با یک کلسیم، تزیین شده و مورد عمل بهینه سازی قرار گرفت. در ادامه بهترتیب بهینه سازی ساختار در حضور یک تا شش مولکول هیدروژن صورت گرفته و در نهایت یک کلسیم تزیین شده به همراه شش مولکول هیدروژن جذب شده برروی حلقه چهارعضوی دیگر نیز تعمیم یافت. در نهایت ساختار نهایی B12P12Ca2.(H2)12 مورد بهینه-سازی قرار گرفت. برای درک بهتر، تصویر ساختار نهایی بهینه شده به همراه نمودار PDOS همان ساختار در شکل (۱) و برخی پارامتر های حاصل از بهینه سازی در جدول (۱) آمده است.

داسکاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ تان ۱۴۰۳



شكل ((a) : ساختار بهينه شده B12P12Ca2.(H2)12 : نمودار (b) B12P12Ca2.(H2)13 بر حسب (a) ا

ساختار	E _{ads} (eV)	d _{H-H} (Å)	d _{Ca-H2} (Å)
$B_{12}P_{12}Ca.(H_2)$	-•.17	۰.۷۵۳	۳.۴۱
$B_{12}P_{12}Ca.(H_2)_2$	-•.1۴	• .٧۶•	۲.۵۳
$B_{12}P_{12}Ca.(H_2)_3$	-•.19	۰.٧۶٩	۲.۴۳
$B_{12}P_{12}Ca.(H_2)_4$	۳۱. ۰-	۰.٧۶۳	T.99
B ₁₂ P ₁₂ Ca.(H ₂) ₅	-•.1۴	• .٧۶•	7.94
$B_{12}P_{12}Ca.(H2)_6$	۰.۱۳	۰.۷۵۹	۳.1۰

جدول ۱ : اطلاعات ساختاری ترکیبات شامل میانگین فاصله پیوندی کلسیم – هیدروژن (d Ca-H2)، میانگین فاصله پیوندی هیدروژن–هیدروژن (d H-H) و انرژی جذب (Eads) برای هر ساختار

با توجه به جدول (۱) انرژی جذب برای تمامی ساختار ها بین v ۲۰.۱ eV - تا v ۷ ۰.۸ - است که این میزان با استاندارد های تعریف شده توسط دپارتمان انرژی ایالات متحده سازگار میباشد (۴). از طرف دیگر با افزایش هر هیدروژن در ساختار، میانگین d_{Ca-12} نیز بیشتر میشود در حالی که H-H تقریبا ثابت است. همان طور که در نمودار شکل (۱) دیده میشود، با محاسبه دانسیته حالت جزئی برای تمامی اتم ها در ساختار نهایی، پیک های مربوط به هیدروژن در منطقه سطح فرمی تاییدی محاسبه دانسیته حالت جزئی برای تمامی اتم ها در ساختار نهایی، پیک های مربوط به هیدروژن در منطقه سطح فرمی تاییدی بر همپوشانی اوربیتال های هیدروژن با اوربیتال های موجود در ساختار بوده و جذب هیدروژن در ساختار تزیین شده را نیز بر همپوشانی اوربیتال های هیدروژن با وربیتال های موجود در ساختار بوده و جذب هیدروژن در ساختار تزیین شده را نیز را در میکند. بررسی های نهایی نشان می دهد ساختار Bl2P1 تزیین شده با دو کلسیم، توانایی جذب ۲۱ مولکول هیدروژن را دارد که سبب بدست آمدن درصد چگالی وزنی ۳.۹۹۲



منابع و مراجع

[1] Liu, P., Zhang, Y., & Liu, F. (2024). Hydrogen storage in Na decorated heteroborospherene Si4B32: Insights from density functional study. *International Journal of Hydrogen Energy*, *50*, 93-101.

[2] Kaviani, S., Piyanzina, I., Nedopekin, O. V., & Tayurskii, D. A. (2023). A DFT-D3 investigation on Li, Na, and K decorated C6O6Li6 cluster as a new promising hydrogen storage system. *International Journal of Hydrogen Energy*, 48(77), 30069-30084.

[3]Rad, A. S., & Ayub, K. (2018). How can nickel decoration affect H2 adsorption on B12P12 nanoheterostructures?. *Journal of Molecular Liquids*, 255, 168-175.

[4]_Du, J., Sun, X., Zhang, L., Zhang, C., & Jiang, G. (2018). Hydrogen storage of Li4&B36 cluster. *Scientific Reports*, 8(1), 1940.



دانگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

مجید محمدی'**، مهدی وادی'، نرگس باقری"،خدیجه شکوهی ٔ.

۱ و *- شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد فیروزآباد، majedmohamadi63@gmail.com ۲- شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد فیروزآباد، mahdi_vadi@iaufasa.ac.ir ۴- شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد فیروزآباد، sh.shekoohi@gmail.com

واژگان كليدى: نانولولە، كارباماز پين، ايزوترم، ترموديناميك، سينتيك.

۱– مقدمه

انتخاب حامل مناسب بر اساس نانومواد نقش مهمی در دارو رسانی دارد. برای رسیدن به این هدف، بسیاری از گروه های تحقیقاتی حامل های مختلفی را برای تحویل دارو به سلول های هدف پیشنهاد کرده اند (۶–۱). در واقع، مولکول های دارو می توانند هم از نظر شیمیایی و هم از نظر فیزیکی تحت شرایط مختلف با حامل ترکیب شوند.یکی از سودمندترین حامل ها کرما ما هستند زیرا آنها نسبت سطح به حجم بالا، چگالی کم و عوارض جانبی کمتری دارند(۷).نانولوله های کربنی چند جداره ها هستند زیرا آنها نسبت سطح به حجم بالا، چگالی کم و عوارض جانبی کمتری دارند(۷).نانولوله های کربنی چند جداره این حامل برای تقویت انتشار کنترل شده داروی نامحلول دی پیریدامول(۱۴)استفاده قرار گرفته اند(۱۳–۸).به عنوان مثال، این حامل برای تقویت انتشار کنترل شده داروی نامحلول دی پیریدامول(۱۴)استفاده شده است.در مطالعه دیگری،نانولوله ها برای برای بیفیدوباکتریوم لانگوم اصلاح شده ژنتیکی معرفی شده است زیرا می توانند تبدیل شوند به یک غشای ضخیری(۱). بنابراین، در این مطالعه ماز کرفته اند(۲۳–۸). به عنوان مثال، این حامل برای تقویت انتشار کنترل شده داروی نامحلول دی پیریدامول(۱۴)استفاده شده است.در مطالعه دیگری،نانولوله ها در این حامل برای تقویت انتشار کنترل شده داروی نامحلول دی پیریدامول(۱۴)استفاده شده است.در مطالعه دیگری،نانولوله ها برای بیفیدوباکتریوم لانگوم اصلاح شده ژنتیکی معرفی شده است زیرا می توانند تبدیل شوند به یک غشای ضخیری(۱). بنابراین، در این مطالعه،از TMWCNTs به عنوان جاذب برای مولکول های دارو استفاده گردید.داروی کاربامازپین (CBZ) دارای نام تجاری در این مطالعه،از CDS) درمان صرع، دردهای نوروپاتی و اختلال دوقطبی مورد استفاده قرار می گیرد. دارای فرمول در این مرول دارای درمان صرع، دردهای نوروپاتی و اختلال دوقطبی مورد استفاده قرار می گیرد. دارای فرمول دارای در دارای فرمول در این مولکولی دارای درمان صرع، دردهای نوروپاتی و اختلال دوقطبی مورد استفاده قرار می گیرد. دارای دار





شکل۱: ساختار کاربامازپین در حالت های دو بعدی و سه بعدی.



۲- مواد و روش

نانولوله کربنی چند جداره (وزن ۵ گرم، ۲۰- ۱۰-OD نانومتر،طول ۳۰ میکرومتر، خلوص > ۹۵ درصد وزنی و چگالی واقعی ۲/۱ گرم بر سانتی متر مکعب) شرکت نوترینو اسپانیا وداروی کاربامازپین از شرکت سبحان دارو. ابتدا با حل کردن ۰/۰۵ گرم دارو در ۵۰۰ میلی لیتر محلول استاندارد (۱۰۰ میلی گرم در لیتر) تهیه شد.محلول های ۱۰ تا ۶۰ میلی گرم در لیتر تهیه و سپس ۱۰ میلی لیتر از هر غلظت و ۱۰ میلی گرم جاذب تهیه و نمونه به دست آمده بر روی همزن مغناطیسی (Wison 10 Model العاد (Mr3001 Model) با سرعت ۱۰۰۰ دور در دقیقه تکان داده شدند.سپس هر نمونه سانتریفیوژ و میزان با استفاده از Vis

۳. نتایج و بحث

۱-۳.خصوصیات جاذب و جذب شونده

ساختار و مورفولوژی CBZ و MWCNT توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی(SEM) بررسی شدند (شکل ۲).



(ب)

(ج)

(الف)

شکل۲ : تصاویر بدست آمده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) برای نانولوله کربنی چند جداره (الف) ، CBZ (ب) و بعد از فرآیند جذب (ج)

۲-۳. جذب تعادلی ایزوترم ها

در این پژوهش، سه مدل ایزوترم معروف،ایزوترم های لانگمویر، فروندلیچ و تمکین به منظور مطالعه تعامل بین CBZ (به عنوان جذب شونده) و MWCNT (به عنوان جاذب) بودند.ابتدا، غلظت تعادلی (Ce، غلظت CBZ آزاد در محلول) با معادله (۱) محاسبه شد(۱۷).

(١)

$$q_e = \frac{(C0 - Ce)V}{W}$$

که در این رابطه پارامترهای C_e ، C₀ و Wبه ترتیب عبارتند از غلظت اولیه و تعادلی CBZ، حجم محلول و وزن نانولوله چند جداره در حالت خشک می باشد.



۳–۲–۱. مدل لانگموير

(2)

اساس این مدل این است که هر سایت جذب می تواند توسط یک جذب شونده به خاطر ایجاد یک لایه روی سطح جادب اشغال شود. علاوه بر این، تمام سایتهای جذب به لحاظ انرژی معادل با مولکول های جذب شونده بدون برهمکنش در نظر گرفته می شوند (۱۸). این مدل جذب سطحی که بطور عادی بیشتر بکار میرود با معادله (۲) توضیح داده می شود:

 $\frac{Ce}{qe} = \frac{1}{q_{mb}} + \frac{Ce}{q_{m}}$

در این معادله، پارامتر q_e مقدار داروی جذب شده از محلول، C_e غلطت دارو در لحظه تعادل، q_m بیشترین ظرفیت جذب یک لایه کامل روی سطح جاذب بر حسب میلی گرم بر گرم (mg. g⁻¹) b ثابت تعادل جذب که به نوعی نشان دهنده انرژی جذب می تواند باشد. ثابت لانگمویر، بیانگر ظرفیت جذب تعادلی تشکیل یک لایه کامل در سطح جاذب است. پارامترهای مدل لانگمویر در سه دمای مختلف ۳۰۳، ۳۰۸ و ۳۱۸ کلوین و با رسم C_e/q_e در مقابل C_e (شکل ۳) محاسبه می شود پارامترها در جدول ۱ آورده شده است.



شکل۳ : همدمای جذب سطحی CBZ بر اساس مدل لانگمویر در سه دمای ۳۰۳ (الف)، ۳۰۸ (ب)، و (ج) ۳۱۸

T(K)	R ²	b(L.mg ⁻¹)	$q_{m}(mg. g^{-1})$			
۳۰۳	•/980	•/11۵	۴۵/۸۷			
۳۰۸	•/931	•/١•١	37/47			
317	•/٩١٩	•/• ٧۶	37/38			

جدول ۱: پارامترهای جذب سطحی در مدل لانگمویر

عامل جداسازی (RL) (جدول۲) به عنوان یک ویژگی مهم مدل لانگمویر توسط رابطه زیر محاسبه گردید (۱۹).

$$RL = \frac{1}{1+b.Ce}$$
(7)

یمی فنریک ایران ۱۴۰۳ ، ۲۰۳ ۱۴۰۳ ، ۲۰۳	میت و جهار مین کنفرانس دانتگاه اصفهان ۲۹و. دانتگاه اصفهان ۲۹و.	
 سازی در فرایند جذب	جدول۲ : محدوده فاکتور جدا	
$R_{\rm L}$ value	فرايند جدب	
 $R_{L} > 1$	نامطلوب	
$R_L = 1$	خطی	
$0 < R_L > 1$	مطلوب	
$R_L = 0$	برگشت ناپذیر	

شکل۴ : نمودارعامل جداسازی(RL) در دماهای ۳۱۸ و ۳۰۳، ۳۰۸ کلوین

۲-۲-۳. مدل فراندليچ

اصلي ترين فرض اين معادله تجربي اين است كه بيشتر براي درك يونها روى سطح ناهمگن با جذب سطحي چند لايهاي بكار برده و مورد بررسی قرار می گیرد. در واقع، با افزایش مقدار جذب شونده روی سطح جاذب آنتالپی به لحاظ آزمایشگاهی کاهش می یابد. در مدل لانگمویر فرض می شود که آنتالپی جذب مستقل از مقدار جذب در روی سطح است (۲۰).همدمای جذب این مدل توسط معادله زیر توضیح داده می شود: $\ln q_e = \ln K_F + 1/n \ln C_e$

(۴)

در این رابطه، ثابت K_F نشاندهنده ظرفیت جذب بر حسب میلی گرم بر لیتر (ppm) است و n یک پارامتر بدون بعد در ارتباط با شدت جذب است. مدل فراندلیچ بر اساس جذب تک لایهای به روی مکانهای جذب هتروژن و دارای انرژی های نابرابر و غیرهمسان بنا نهاده شده است.در ایزوترم فراندلیچ زمانی که K_F افزایش میابد ظرفیت جذب جاذب برای جذب داروی مورد نظر افزایش می یابد، همچنین مقدار n بین • تا ۱ نشان دهنده فرآیند جذب مناسب می باشد. اگر مقدار n به ۱ نزدیکتر باشد. هتروژن بودن سطح کم اهمیت تر و اگر بزرگتر از یک باشد مهمتر می شود.نتایج در شکل۵ و جدول۳ قابل مشاهده است.





شکل ۵ : همدمای جذب سطحی CBZ بر اساس مدل فراندلیچ در سه دمای ۳۰۳ (الف)، ۳۰۸ (ب)، و ۳۱۸ (ج)

T(K)	R ²	n	K _F
۳۰۳	•/9٣٢	١/٩٧	٧/•٢
۳۰۸	•/٩۶٢	۲/۰۵	۵/۶۳
317	۰/٩۶٣	١/٩۵	۴/۰۰

جدول ۳ : یارامترهای جذب سطحی در مدل فراندلیچ

۳-۲-۳. مدل تمکین

در مقایسه با دو مدل ذکر شده بالا، همدمای تجربی تمکین حاوی یک فاکتور است که اندرکنشهای بین جاذب و ذرات جذب شونده را در غلظت های بزرگ و پائین به وضوح نشان میدهد(۲۱).در همدمای تمکین، جذب با یک توزیع واحد انرژی اتصال به صورت خطی نشان داده می شود که از رابطه ۵ بدست میآید:

(۵)

 $q_e = B \ln A + B \ln C_e$

در این رابطه، B یک ثابت بدون بعد در ارتباط با گرمای جذب است، R ثابت عمومی گازهای ایده آل (⁻⁻ K⁻¹ B 8.314 J mol)، و پارامتر A بر حسب لیتر بر گرم (L. g⁻¹)، و پارامتر A بر حسب لیتر بر گرم (L. g⁻¹)، ژ ثابت اتصال تعادلی در ارتباط با بیشترین انرژی اتصال می باشد.نتایج در شکل ۶ و جدول ۴ قابل مشاهده است.





T(K)	R ²	В	$A(L. g^{-1})$
۳۰۳	۰/۹۲۵	٩/۶٢	١/٣٠
٣٠٨	۰/۹۳۵	۸/۰۲	١/•٨
۳۱۸	•/945	٧/١٣	•/\7

جدول۴ : پارامترهای جذب سطحی در مدل تمکین



۳-۳. تاثیر پارامترهای pH و غلظت بر جذب

pH محلول به عنوان پارامتر موثر در فرآیند جذب برای دست یابی به بینش بیشتر در مورد فرآیند جذب مورد بررسی قرار گرفت (شکل۷). استفاده از محلول های رقیق اسید هیدروکلریک (HCl) و باز سدیم هیدروکسید (NaOH) برای کنترل پارامترهای pH استفاده شد. تعیین pH بهینه جذب در غلظت های ۴۰ و ۶۰ میلی گرم بر لیتر مورد بررسی قرار گرفت و بیشترین مقدار جذب در pH اسیدی (pH=2) انجام گرفته است (جدول۵).



شکل ۷ : نمودار تغییرات جذب نسبت به تغییرات pH

 ${
m H}^+$ این کاهش میزان جذب در pH های بالا را می توان مربوط به دهیدروژنه شدن مولکول جذب شونده باشد.با از دست دادن ${
m H}^+$ و شکسته شدن حلقه های بنزن میزان جذب این حلقه ها کم شده است.

$C(mg.g^{-1})$	pH					
	٢	۴	۶	٨	١٠	١٢
۴.	۲ ۱/۸۲	۲۰/۷۳	۱۹/۹	٩/•٨	۵/۲۵	۳/۳۳
۶۰	44/30	30/40	30/18	۲۶/۳۸	24/32	22/21

جدول۵: نمودار تغییرات جذب نسبت به تغییرات pH

غلظت نیز به عنوان یک عامل موثر در فرآیند جذب مورد بررسی قرار گرفت و با افزایش غلظت محلول CBZ مقدار جذب از غلظت ۲۰ تا ۶۰ پی پی ام افزایش یافت (شکل ۸).



شکل ۸ : نمودار تغییرات جذب نسبت به تغییرات غلظت



۴–۳. تاثیر دما و معادلات ترمودینامیکی

ترمودینامیک جذب داروی CBZ بر روی نانولوله کربنی چند جداره در دماهای (۳۰۳، ۳۰۸ و ۳۱۸) بررسی و پارامترهای ترمودینامیکی با استفاده از معادلات زیر محاسبه شد(۱۹). نتایج در شکل۹و جدول۶ قایل مشاهده است.

$$\label{eq:LnKF} \begin{split} LnK_F &= -\Delta H^0/RT + \Delta S^0/R & (\ensuremath{\mathcal{F}}) \\ \Delta G^0 &= -RTLnK_F & (\ensuremath{\mathcal{V}}) \\ \Delta S^0 &= \Delta H^0 - \Delta G^0/T & (\ensuremath{\mathcal{A}}) \end{split}$$

در روابط بالا ΔS^0 ، ΔH^0 و ΔG^0 به ترتیب عبارتند از تغییرات انتروپی، آنتالپی و انرژی آزاد گیبس. T دما بر حسب کلوین، R ثابت گاز و K_F ثابت تعادل در مدل فراندلیچ است.



شکل ۹ : نمودار ثابت تعادل در معادله فراندلیچ (K_F) و $rac{1}{r}$ در سه دمای ۳۰۳، ۳۰۸، و ۳۱۸ کلوین

T(K)	lnK _F	$\Delta G(kj.mol^{-1})$	$\Delta H(kj.mol^{-1})$	$\Delta S(J.k^{-1}.mol^{-1})$
۳۰۳	۱/۹۳	-۴/۹١	- ۲ <i>۳</i> /۳	- % •/ % ٩
۳۰۸	١/٧٣	_ F / FW		
۳۱۸	١/٣٩	-٣/۶٧		

جدول ۶: پارامترهای ترمودینامیکی فرایند جذب

با توجه به جدول ۶ مقدار منفی مقدار انتالپی در تمام دماهای مورد مطالعه برای فرایند جذب دارو بر روی نانولوله کربنی چند جداره،نشان می دهد که فرآیند یک فرایند فیزیکی است. در کنار اینها، مقدار منفی کم انتروپی نشان می دهد که دارو در نقطه اتصال محلول – جاذب بطور منظم قرار گرفته اند. علاوه بر این، مقدار منفی انرژی آزاد گیبس در سه دمای تست شده نشان می دهد که مقدار آن با افزایش دما کاهش می یابد و بنابراین جذب را نامطلوب ونامناسب می کند، همچنین این مقدار منفی نشان دهنده خود به خودی بودن فرآیند جذب می باشد.



۵–۳. تاثیر زمان تماس و سینتیک جذب

سینتیک شیمیایی، مطالعه علمی سرعت فرآیندهای شیمیایی است و باعث درک دقیقی از عوامل موثر بر سرعت واکنش های شیمیایی می شود. همچنین سینتیک شیمیایی عوامل و شرایط موثر برای واکنش ها را در رسیدن به حالت تعادل بررسی می کند. نمودار q_e در مقابل زمان در سه غلظت ۲۰، ۳۰ و ۴۰ میلی گرم بر لیتر در شکل ۱۰ نشان داده شده است.



شکل ۱۰: نمودار تاثیر غلظت بر سینتیک جذب

همانطور که در شکل ۱۰ قابل مشاهده است، مقدار q_e به تدریج تا ۹۰ دقیقه افزایش می یابد و به یک حالت ایستا (حالت تعادل) می رسند. رسیدن به حالت تعادل بعد از ۹۰ دقیقه نشان می دهد که سنتیک جذب سریع است. سنتیک شیمیایی شامل رصد دقیق شرایطی است که بر روی سرعت واکنشهای شیمیایی تاثیر گذار است تا به حالت تعادل برسد(۲۲).برای رسیدن به این هدف در مرحله اول، غلظت تعادلی لحظه ای (Cie) داروهای اعصاب و روان در هر زمان اندازه گیری می شود. سپس، ظرفیت جذب لحظه ای با معادله زیر بدست می آید:

 q_t

(9)

$$q_t = (C_0 - C_{ie}) V/W$$

Tala cles های بدست آمده با مدل سنتیکی شبه مرتبه اول و دوم فیت شد(۲۴-۲۳).
 $ln(q_e - q_t) = lnq_e - k_1$
 (1)
 $t/q_t = 1/k_2q_e + t/q_t$
 (1)
 $t/q_t = 1/k_2q_e + t/q_t$
 (1)
 K_1 g.min.mg⁻¹ end
 K_1 g.min.mg⁻¹ end
 K_1 end
 K_1 end
 K_1 end
 K_2 end
 K_1 end

دوم، p و p و q یه ترتیب ظرفیت جذب لحظه ای و تعادلی است. اگر نمودار (ln(q- q، l در مقابل t رسم شود، شیب نمودار نشان دهنده ثابت سرعت مرتبه اول و اگر <mark>t</mark> را در مقابل t رسم شود با توجه به عرض از مبدا نمودار ثابت سرعت مرتبه دوم (K2) را می توان به راحتی بدست آورد. این نمودارهای خطی در سه غلظت رسم شده که در شکل ۱۱ آورده شده است.



شکل ۱۱: نمودار سینتیک مرتبه اول (الف) و (ب)سنتیک مرتبه دوم

میں فنریک ایران میں فنریک ایران دانتگاہ اصفہان ۲۹و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

تمام داده های سنتیکی مرتبه اول و دوم در جدول ۷ آورده شده است. مقایسه ضریب رگرسیون (R²) و ثابت تعادل مرتبه اول (K₁) برای سه غلظت تست شده بر اساس مدل خطی سنتیکی مرتبه اول است که نشان می دهد که افزایش غلظت دارو باعث افزایش این مقدار می شود. این نتایج با داده های بدست آمده از مدل جذبی لانگمویر توافق خوبی دارد که در غلظت بالا شرایط برای ظرفیت جذب بالا مناسب می باشد.

		مرتبه اول							
$C(mg.g^{-1})$	$q_{e}(mg.g^{-1})$	$K_1(1.min^{-1})$	R ²	K ₂ (g.min.mg ⁻¹)	R ²				
۲.	18/88	۰/۰ ۱۶	٠/٩٨٩	•/••۳۵	•/949				
٣٠	۲ • /۸۶	•/• \Y	۰/۹۸۶	•/•1۴	۰/۹۰۸				
4.	$r \Delta / \cdot \lambda$	•/•14	•/१९٣	•/• \ \	•/941				

جدول ۷ : پارامترهای سنتیکی مرتبه اول و دوم فرایند جذب.

۴. بحث و نتیجه گیری

در این تحقیق جذب داروی اعصاب و روان CBZ بوسیله نانولوله کربنی چند جداره در سه دمای ۳۰۳، ۳۰۸ و ۳۱۸ کلوین مورد بررسی قرار گرفت. مقایسه پارامترهای ترمودینامیکی نشان داد که بر اساس سه مدل جذبی لانگمویر،فراندلیچ و تمکین ، بهترین دما که جذب در آن صورت می گیرد دمای ۳۰۳ کلوین می باشد. نتایج حاصل از این تحقیق نشان داد که بهترین غلظت برای مناسب ترین جذب در آن صورت می گیرد دمای ۳۰۳ کلوین می باشد. نتایج حاصل از این تحقیق نشان داد که بهترین غلظت برای مناس داد که بهترین غلظت بهترین دما که جذب در آن صورت می گیرد دمای ۳۰۳ کلوین می باشد. نتایج حاصل از این تحقیق نشان داد که بهترین غلظت برای مناسب ترین جذب ۶۰ میلی گرم بر لیتر در محیط اسیدی می باشد. پارامترهای منفی ترمودینامیکی (ΔH⁰، ΔB⁰ و ΔS⁰) نشان می دهد که فرایند جذب این دارو بر روی نانولوله کربنی چند جداره یک فرایند گرمازا می باشد. همچنین مطالعات سنتیکی نشان داد که این فرایند جذب این دارو بر روی نانولوله کربنی چند جداره یک فرایند می می باشد. کرمازا می باشد. همچنین مطالعات منان می دهد که فرایند جذب این دارو بر روی نانولوله کربنی چند جداره یک فرایند گرمازا می باشد. همچنین مطالعات می دهد که ولیند و زمای کرماز می باشد. همچنین مطالعات منان داد که این فرایند جذب این دارو بر روی نانولوله کربنی چند جداره یک فرایند گرمازا می باشد. همچنین مطالعات می درمان داد که این فرایند جذب این دارو می می درمان می درمان می درمان می دارو بر می می کند و پیش بینی می کند که به دلیل موارد ذکر شده دارو به خوبی روی نانولوله کربنی چند جداره جذب شده است.

منابع و مراجع

1.Eshghi, F., Ghahramani, Z., Ghoreishi, R. & Ghahremani, S. Improvement of floxuridine anti-cancer adsorption on boron carbonitride nanotubes with iron doping: a theoretical study. Theor. Chem. Acc. 140, 119 (2021). 2. Jorshari, M. R., Mamaghani, M. & Jahanshahi, P. Synthesis, delivery, and molecular docking of fused quinolines as inhibitor of Hepatitis A virus 3C proteinase. Sci. Rep. 11, 18970 (2021). 3. Esmaeili, S., Samadizadeh, M. & Khaleghian, M. Evaluating role of the x- π (x = π and/or CH) stacking interactions in adsorption of the (4E,4E)-4-(4-hydroxyphenyldiazenyl)-N- ((furan-2-Yl)methylene)benzenamine antibacterial in armchair boron nitride nanotube. Chem. Pap. 74, 2991-3000 (2020).4. Eshghi, F. & Eshghi, H. Influence sandwich π - π stacking interactions in Benzaldoxime adsorption on the fullerene. Fullerenes, Nanotub. Carbon Nanostructures 29, 227-231 (2021). 5. Eshghi, F. et al. Photocatalytic degradation of remdesivir nucleotide pro-drug using [Cu(1methylimidazole)4(SCN)2] nanocomplex synthesized by sonochemical process: Theoretical, hirshfeld surface analysis, degradation kinetic, and thermodynamic studies. Environ. Res. 222, 115321 (2023). 6. Ghoreishi, R. & Kia, M. Chemical reactivity and adsorption properties of pro-carbazine anti-cancer drug on gallium-doped nanotubes: a quantum chemical study. J. Mol. Model. 18, 25, 46 (2019). 7. Prajapati, S. K., Malaiya, A., Kesharwani, P., Soni, D. & Jain, A. Biomedical applications and toxicities of 435-450 carbon nanotubes. Drug Chem. Toxicol. 45, (2022).8. Yang, Z. et al. Pharmacological and toxicological target organelles and safe use of singlewalled carbon nanotubes as drug carriers in treating Alzheimer disease. Nanomedicine Nanotechnology, Biol. Med. 6, 427-441 (2010).

9. Wang, R., Zhang, D. & Liu, C. DFT study of the adsorption of 2,3,7,8-tetrachlorodibenzop-dioxin on pristine and Ni-doped boron nitride nanotubes. *Chemosphere* 168, 18–24 (2017).



10. Zhu, W. et al. Multi-walled carbon nanotube-based systems for improving the controlled release of insolubledrugdipyridamole.ExpTherMed17,4610–4616(2019).11. Guo, Q., Shen, X., Li, Y. & Xu, S. Carbon nanotubes-based drug delivery to cancer and brain. Curr. Med. Sci.37,635–641(2017).12. Nagai, H. et al. Diameter and rigidity of multiwalled carbon nanotubes are critical factors in mesothelial injury

Nagai, H. *et al.* Diameter and rightly of multivalide carbon nanotubes are critical factors in mesonelial injury and carcinogenesis. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 108, E1330–E1338 (2011).
 Moayyedi, P. *et al.* Pantoprazole to Prevent Gastroduodenal Events in Patients Receiving Rivaroxaban and/or Aspirin in a Randomized, Double-Blind, Placebo-Controlled Trial. *Gastroenterology* 157, 403-412.e5 (2019).
 Li, W. *et al.* Discovery of Novel Quinoline–Chalcone Derivatives as Potent Antitumor Agents with Microtubule Polymerization Inhibitory Activity. *J. Med. Chem.* 62, 993–1013 (2019).

15.Del Río Castillo, A. E., De León-Rodriguez, A., Terrones, M. & Barba de la Rosa, A. P. Multi-walled carbon nanotubes enhance the genetic transformation of Bifidobacterium longum. *Carbon N. Y.* 184, 902–909 (2021).

16.Zahra Tolou-Ghamari Mohammad Zare, Jafar Mehvari Habibabadi, M. R. N. A quick review of carbamazepine pharmacokinetics in epilepsy from 1953 to 2012. *J Res Med Sci* (2013).

17. G. Crini, H. N. Peindy, F. Gimbert, C. Robert, Sep. Purif. Technol. 2007, 53, 97.

18. M. Y. Abdelnaeim, I. Y. El Sherif, A. A. Attia, N. A. Fathy, M. F. El-Shahat, Int. J. Miner. Process. 2016, 157, 80.

19.Y. Wang, S.-T. Yang, Y. Wang, Y. Liu, H. Wang, Colloids Surf. B Biointerfaces 2012, 97, 62. 20.J. C. Crittenden, M. Walter, J. Weber Jr., Civ. Eng. Database1978, 104, 1175. Technol. 21.M. Ozacar, I. А. Sengil, Bioresour. 2005, 96, 791. 22. H. Al-Johani, M. A. Salam, J. Colloid Interface Sci. 2011, 360, 760.

23.H. Qiu, L. Lv, B. Pan, Q. Zhang, W. Zhang, Q. Zhang, J. Zhejiang Univ. A. 2009, 10, 716. 24.Y. S. Ho, J. Hazard. Mater. 2006, 136, 681.



بررسی ترکیبات هیدروکسی آنتروپی بالای فلزات واسطه به منظور کاربردهای تولید و ذخیره انرژی

نسيم محمدي باورياني""، بهروز واثقى"، قاسم رضايي"، جعفر جليليان أ

۱ و*- دانشجو، فیزیک(ماده چگال)، فیزیک،علوم پایه دانشگاه یاسوج nasimmh1678@gmail.com ۲- استاد تمام ،فیزیک(ماده چگال) ، فیزیک، علوم پایه دانشگاه یاسوج bvaseghi1@gmail.com ۳- استاد تمام ،فیزیک(ماده چگال) ، فیزیک، گروه، علوم پایه دانشگاه یاسوج ۴- پسادکتری ،فیزیک(ماده چگال) ، فیزیک، گروه، علوم پایه دانشگاه یاسوج

واژگان كليدى: تركيبات آنتروپى بالا، الكتروشيمى، باطرى، ابرخازن، انباشت الكتروشيميايى

۱–مقدمه

در جهان امروزی، با کاهش منابع سوخت فسیلی و افزایش تقاضای انرژی، توجه به منابع انرژی تجدیدپذیر به عنوان یک راهکار پایدار برای تأمین انرژی مورد نیاز بشر، بیش از پیش ضروری شده است. منابع انرژی تجدیدپذیر مانند انرژی خورشیدی، بادی، زیست توده، آبی و زمین گرمایی، مزایای زیادی نسبت به منابع انرژی فسیلی دارند. از جمله این مزایا پایداری، آلودگی کمتر و هزینه کمتر است. با این حال، منابع انرژی تجدیدپذیر مانند انرژی خورشیدی، بادی، زیست توده، آبی و زمین گرمایی، مزایای زیادی نسبت به منابع انرژی فسیلی دارند. از جمله این مزایا پایداری، آلودگی کمتر و هزینه کمتر است. با این حال، منابع انرژی تجدیدپذیر ماند انرژی مور مده بات بادی، زیست توده، آبی و زمین گرمایی، مزایای زیادی نسبت به منابع انرژی فسیلی دارند. از جمله این مزایا پایداری، آلودگی کمتر و هزینه کمتر است. با این حال، منابع انرژی تجدیدپذیر محدودیت هایی نیز دارند. یکی از این محدودیت ها، عدم ثبات تولید انرژی است. با توسعه فناوریهای ذخیره انرژی، می توان محدودیتهای این منابع را برطرف کرد و از مزایای آنها به طور کامل بهرهمند شد.[1]

۲- جزییات آزمایش

مواد اولیه مانند: کلرید منگنز، کلرید آهن، کلرید کبالت، کلرید مس، کلرید روی، هیدروکسید پتاسیم و اتانول با خلوص ۹۹٪ از شرکت مرک آلمان خریداری شدند. برای ساخت الکترود در ابتدا، فوم نیکل را در ابعاد cm² ا×1 برش می دهیم. جهت آمادهسازی سطح فومهای نیکل برای فرایند سنتز نانومواد، فوم نیکل را به مدت ۱۰ دقیقه تحت حمام اولتراسونیک در محلول ۱ مولار هیدروکلریک اسید قرار داده تا از هرگونه آلودگی و اکسید سطحی پاک شوند. پس از شستشوی کامل با آب مقطر و (مادول)، نمونهها در آون با دمای ۴۰ درجه سانتی گراد خشک می شوند. محلولهای آبی 0.09 مولار از نمکهای کلرید منگنز (سازل) آهن(Fecl2) کبالت(Cocl2) مس (Cocl2) و روی (ZnCl2) به طور جداگانه و به صورت آنتروپی بالا در 30 میلی (شارت ایتر آب مقطر تهیه و به مدت 5 دقیقه همگن شدند. از طریق روش رسوب گذاری الکتروشیمیایی پتانسیواستاتیک، در پتانسیل ثابت 1- ولت نسبت به الکترود مرجع Ag/AgCl، نانوساختارهای هر فلز به مدت 300 ثانیه بر روی زیرلایه فوم نیکل رسوب داده شد. لازم به ذکر است که، پیش و پس از رسوب گذاری، جرم زیرلایه را با ترازوی دقیق اندازه گیری می کنیم تا میزان داده شد. لازم به ذکر است که، پیش و پس از رسوب گذاری، جرم زیرلایه را با ترازوی دقیق اندازه گیری می کنیم تا میزان

۳-بحث ونتايج

مورفولوژی و ساختار الکترودهای ساخته شده به صورت تک عنصری و آنتروپی بالا به وسیله میکروسکوپ الکترونی-روبشی مشخصهیابی شد. بر اساس تصاویر بدست آمده برای تمامی نمونهها، ساختار ورقهای ترکیبات هیدروکسید بهوضوح مشاهده می شود این ساختار ورقه ورقهای، محل مناسبی برای قرارگیری یونهای الکترولیت حین شارژ و دشارژ هستند[4]. علاوه براین، آنالیز طیف سنجی پراکندگی انرژی وجود تمام عناصر را در نمونه آنتروپی بالا نشان می دهد[5]. نتایج حاصل از این آنالیزها، موفقیت روش رسوب الکتروشیمیایی در سنتز نمونه با آنتروپی بالا و توزیع یکنواخت عناصر را تأیید می کند. جهت بررسی عملکرد الکتروشیمیایی و کاربرد نمونههای سنتز شده به عنوان مواد فعال در سیستمهای ذخیره انرژی، آزمونهای ولتامتری چرخهای با نرخهای روبش ۲۰، ۲۰، ۵۰، ۲۰، میلیولت بر ثانیه در محیط الکترولیت 1 مولار KOH انجام شد. در اینجا، پنجره پتانسیل را از 2/0- تا 6/0 نسبت به مرجع Ag/AgCl در نظر گرفتیم.

KOH منحنیهای شارژ و دشارژ الکترودهای ساخته شده از نمونههای تک عنصری و سپس آنتروپی بالا در الکترولیت ۱ مولار KOH در چگالی جریان های 25/0، ۲۰/۰، ۱۵/۰، ۱۰/۰ آمپر بر گرم رسم شدهاند. در این نمودارها، شاخه صعودی بیانگر فرآیند شارژ و افزایش پتانسیل خازن و شاخه نزولی نشاندهنده فرآیند دشارژ در همان چگالی جریان است. بررسی نمودارها نشان می دهد که افزایش چگالی جریان از ۱۰/۰ آمپر بر گرم به بالا، منجر به افزایش سرعت تخلیه در همه نمونهها می شود. این یافته حاکی از آن است که عملکرد خازن در چگالی جریانهای پایین تر بهتر است. در چگالی جریانهای بالا، نفوذ یون به سطح الکترودها با محدودیت زمانی مواجه می شود. این محدودیت زمانی منجر به کاهش عمق نفوذ یون و در نتیجه عدم مشارکت لایههای زیرین الکترود در فرایند ذخیرهسازی بار می شود. نتایج حاصل از این مطالعه نشان داد که نمونه آنتروپی بالا باعث افزایش ظرفیت خازنی می شود. بر اساس مکانیزم ذخیره بار، مکانیزم غالب در نمونهی آنتروپی بالا ، واکنش های تحت کنترل

Min(OH)2	Fe(OH) ₂	Co(OH) ₂		
ender Cu(OB);	difference of the second secon	MuFe Co Cu Za(OH)2	La contraction de la contracti	
			Spectral 1 Data Spectral 1 Data Spectral 1 Basel Loren Loren Di Loren Loren	
om of ele ale to the the be ple ale			تمونه	ظرفيت ويژه(Fg ⁻¹)
Me(OH)2	Fe(OH)	Co(OH),	Mn(OH)2	ft/vt
10 			Fe(OFD2	\$1/4 \$
-1284y'		5 34 -40 AV	Colona	10/01
1.0	1-11		Co(OH)2	1.676.6
			Cu(OH)2	F/FA
			Zn(OH)2	TT/FT
Cu(OH),	Zn(OH),	sunis MarFeiCo/Ni-Cu/Za(OH);	Mn/Fe/Co/Ni/Cu/Zn(OH)2	aviva
			24	1



منابع و مراجع

[1].Raveendran, A., et al., Different electrodeposition techniques of manganese and nickel oxide on nickel foam and their effect on improved supercapacitor behaviour: a comparative study. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 2023. 34 :)30(p. 2018.

[2].Fu, G.R., et al., Electrodeposition of nickel hydroxide films on nickel foil and its electrochemical performances for supercapacitor. International Journal of electrochemical science, 2009.

[3].Zhemi Xu, et al., Electrodeposition of Mesoporous Co3O4Nanosheets on Carbon Foam for High Performance Supercapacitors. Journal of Nanomaterials.2014.

[4].rahman, j.a., et al., A study on factors affecting strength of solidified peat through XRD and FESEM analysis. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 2018.

[5].Charles Crespy, et al., Energy dispersive X-ray diffraction to identify explosive substances: Spectra analysis procedure optimization. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 623.3 2010.



عملکرد کاتالیزوری گرافاین تزیینشده با نیکل برای واکنش تولید هیدروژن

فاطمه متقی^۱، حسین محمدیمنش^{آو*}

۱ – دانشجوی دکتری، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد، (fmotaghi1378@gmail.com) ۲ و * – نویسنده مسئول: دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد، (mohammadimanesh@yazd.ac.ir)

واژگان کلیدی: واکنش تولید هیدروژن، نظریهی تابعی چگالی، نیکل، گرافاین، الکتروکاتالیست.

۱– مقدمه

با افزایش جمعیت جهان، تقاضا و مصرف انرژی به طور قابل توجهی تشدید شده است و حدود ۸۵ درصد از این نیاز انرژی به وسیلهی سوختهای فسیلی تأمین میگردد (آکر، ۲۰۱۵). یکی از روشهای امیدوارکننده برای تبدیل و ذخیرهسازی انرژی خورشیدی، استفاده از واکنش تولید هیدروژن (HER) از طریق شکافت آب با فوتوکاتالیزور است. هیدروژن به دلیل مزایایی مانند منابع اولیهی گوناگون از جمله زیست توده یا آب، بازده انرژی زیاد، سوخت سبز و قابلیت ذخیرهسازی، جایگزین مناسبی برای سوختهای فسیلی است. هیدروژن به دلیل مزایایی مانند منابع اولیهی گوناگون از جمله زیست توده یا آب، بازده انرژی زیاد، سوخت سبز و قابلیت ذخیرهسازی، جایگزین مناسبی برای سوختهای فسیلی است. در این زمینه، بسیاری از پژوهشگران روشهای مختلفی برای تولید هیدروژن از منابع تجدیدپذیر ار ابررسی کردهاند (لیو، ۲۰۱۲). تولید گاز هیدروژن به عنوان انرژی پاک به یکی از چالشهای اصلی برای توسعه جامعه جهانی تبدیل شده است. این مسیر تولید سب مصرف سوختهای فسیلی و نیز انتشار دیاکسیدکربن میشود که مطلوب نیست. به مین دلیل مطرحی یک روش پاک، کارآمد و تجدیدپذیر برای تولید هیدروژن به عنوان انرژی پاک به یکی از چالشهای اصلی برای توسعه جامعه جهانی همین دلیل شده است. این مسیر تولید سبب مصرف سوختهای فسیلی و نیز انتشار دیاکسیدکربن میشود که مطلوب نیست. به همین دلیل، طراحی یک روش پاک، کارآمد و تجدیدپذیر برای تولید هیدروژن عنصری کلیدی برای تحقق موفقیتآمیز اقتصاد هیدروژنی است. امروزه شکافت الکتروشیمیایی آب برای تولید هیدروژن و اکسیژن، به عنوان یک روش پاک، کارآمد و پایدار برای جایگزینی سوختهای فسیلی در نظر گرفته شده است. زیرا آب نه تنها مولکول شروع کنده بلکه محصول جانبی در چرخه برای جایگزینی سوختهای فسیلی در نظر گرفته شده است، زیرا آب نه تنها مولکول شروع کنده بلکه محصول جانبی در چرخه اقتصاد هیدروژن است. (گری، ۲۰۰۹). Here فروکرکتالیستی مزیتهای منوری کنده بلکه محصول جانبی در چرخه مرای جایگزینی سوختهای فسیلی در نظر گرفته شده است، زیرا آب نه تنها مولکول شروع کنده بلکه محصول جانبی در چرخه اقتصاد هیدروژن است (گری، ۲۰۰۹).

۲-روش

در این پژوهش، تمامی محاسبات بر اساس نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از کد Dmol3، تابعهای همبستگی تبادلی (PBE)، تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) و مجموعه پایه دوگانه عددی با توابع قطبش پذیر (DNP) انجام شد. نظریهی تابعی چگالی با استفاده از تقریب تبادلی – همبستگی، پیوندهای یونی و کووالانسی را به طور دقیق توصیف می کند، اما در محاسبهی برهمکنشهای لاندون و واندروالس ناموفق است. این برهمکنشها که نتیجهی همبستگی الکترونها هستند، نقشی کلیدی در فعل و انفعالات شیمیایی مانند برهمکنش بین جاذب و جذب شونده دارند. بنابراین، محاسبه دقیق این برهمکنشها می تواند به نزدیکی نتایج محاسبات نظری به نتایج تجربی کمک کند. برای در نظر گرفتن سهم برهمکنشهای بین مولکولی، از نظریه تابعی چگالی با تصحیح پراکندگی استفاده شد. ابتدا سلول واحد ۲۰۶۴–گرافاین بهینه شد و سپس ساختار بهینه شده به ابر سلول ۲×۲ گسترش یافت و مجدداً بهینهسازی شد که انرژی کل ابر سلول ۱۲٬۶۶–گرافاین به مقدار V۵ میت و جمار مین کنفران شیمی فنریک ایران دانتگاه اصفهان ۲۹و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

رسید. مکانیسم فرآیند HER در شرایط استاندارد (P=1 bar ،U=0 ،pH=0 و T=298.15 K) روی الکتروکاتالیست ۱۲،۶۰۶-گرافاین تزیین شده با نیکل بررسی شد. پنج سایت ۱۲،۶۰۶ - گرافاین در شکل یک نشان داده شده است.



شکل ۱: پنج سایت ۱۲،۶،۶ – گرافاین

۳– بحث

جذب فلز نیکل در پنج سایت مختلف با فواصل متفاوت روی بستر ۶، ۶، ۱۲- گرافاین بررسی شده است. مقادیر فاصله نهایی فلز نیکل از بستر، انرژی کل و انرژی جذب نیکل در این پنج سایت ۱۲، ۶، ۶- گرافاین در جدول ۱ ارائه شده است. با توجه به نتایج، سایت H1 به عنوان بهترین سایت انتخاب شد. سپس انرژی آزاد گیبس واکنش تولید هیدروژن در سه سایت فلز نیکل، H4 و H5 پایدارترین ساختار ۱۲،۶۰۶ گرافاین تریین شده به ترتیب ۸۹۵، ۱۹۵۰ و ۱۱۸۰ الکترونولت محاسبه شد. بنابراین بهترین پتابراین شده با تریین شده به ترتیب ۱۹۵۰ می از ایک می و انرژی مدار به شده است. با توجه به H4 و H5 پایدارترین ساختار ۱۲،۶۰۶ گرافاین تریین شده به ترتیب ۱۹۵۵، ۱۹۵۰ و ۱۱۸۰ الکترونولت محاسبه شد. بنابراین بهترین پتانسیل مازاد در سایت H5 و ۱۹

جدول ۱– مقادیر فاصله نهایی فلز نیکل از بستر، انرژی کل (Etotal) و انرژی جذب (Ead) در سایتهای مختلف (حالت عمودی).

Site	Distance (Å)	E _{total} (eV)	$\Delta E_{ad} (eV)$
H1	0.04	-115609.97	-5.93
H2	0.04	-115608.84	-4.80
Н3	1.43	-115607.17	-3.13
H4	1.78	-115607.54	-3.51
H5	1.78	-115607.54	-3.51

۴- نتیجهگیری

در این پژوهش، با استفاده از روشهای محاسباتی مبتنی بر DFT، عملکرد کاتالیزوری ۶، ۶، ۲۰-گرافاین تزیین شده با نیکل برای HER مورد بررسی قرار گرفت. نتایج محاسبات نشان داد که جذب فلز نیکل برای HER روی پنج سایت مختلف ۶، ۶، ۱۲-گرافاین با یکدیگر متفاوت است. پس از بررسی دقیق مقادیر انرژی جذب (ΔE_{ads}) فلز نیکل، سایت H1 به عنوان مناسبترین مکان به عنوان بستر تزیینشده انتخاب شد. پتانسیل مازاد (۱) برای HER ا ۹۲/۱۰ ولت محاسبه شد. علاوه بر این، محاسبات نشان داد که ΔG برای بستر تزیین شده با نیکل (۷) ۹۲ (۱۹ بسیار نزدیک به مقدار ایده آل (۷) و قابل مقایسه با Δ



کاتالیزورهای پیشرفتهی پلاتین (۰/۰۹ eV-) است. با توجه به عملکرد کاتالیستی این بستر میتواند به عنوان جایگزینی امیدوارکننده برای الکتروکاتالیستهای فعلی در فرآیند شکافت آب و به خصوص HER عمل کند.

منابع و مراجع

[1] Acar, C., & Dincer, I. (2015). Impact assessment and efficiency evaluation of hydrogen production methods. *International journal of energy research*, 39(13), 1757-1768.

[2] Liao, C. H., Huang, C. W., & Wu, J. C. (2012). Hydrogen production from semiconductor-based photocatalysis via water splitting. *Catalysts*, 2(4), 490-516.

[3] Gray, H. B. (2009). Powering the planet with solar fuel. Nature chemistry, 1(1), 7-7.



سنتز و مشخصهیابی نانوذرات مغناطیسی فریت کبالت-روی برای کاربرد در هایپرترمیای پزشکی

محبوبه حقاني، حسين محمديمنش، نعيمه ترابي ميرزايي

۱ – دانشجوی دکتری، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد، (mhaghani@stu.yazd.ac.ir) ۲ و *- نویسنده مسئول: دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد، (mohammadimanesh@yazd.ac.ir) ۳– استادیار، فیزیک، اتمی مولکولی، دانشکده فیزیک و دانشگاه یزد، (ntorabi@yazd.ac.ir)

واژگان كليدى: درمان سرطان، ھايپرترميا، فريت مغناطيسى، فريت كبالت-روى.

۱– مقدمه

نانوذرات مغناطیسی گروهی از نانوذرات هستند که از عناصر مغناطیسی مانند آهن، نیکل، کبالت و آلیاژهای فلزی دیگر تشکیل شدهاند. این نانومواد ویژگیهایی مانند زیستسازگاری، سمیت پایین، مغناطیس اشباع بالا، و خاصیت فرومغناطیس و سوپرپارامغناطیس دارند. یکی از کاربردهای مهم نانوذرات، استفاده از آنها در درمان سرطان با روش هایپرترمیا است (Ge et (al., 2023 . در این روش، با اعمال میدان مغناطیسی متناوب به نانوذرات تزریقشده به بدن، دما در محدوده ۴۲ تا ۴۵ درجه سانتی گراد افزایش مییابد. نانوذرات در این حالت انرژی جذب شده را به صورت گرما آزاد می کنند. زمانی که نانوذرات در معرض میدان مغناطیسی متناوب قرار می گیرند، انرژی جذب شده به صورت گرما آزاد می کنند. زمانی که نانوذرات در معرض فریت کبالت-روی، این ماده به روش هیدروترمال سنتز شد. بررسیهای ساختاری و مغناطیسی نشان دادند که فاز اسپینلی تکفاز بدون حضور فاز ثانویه هماتیت تشکیل شده است (Patade et al., 2020).

۲- مواد و روش انجام آزمایش

مواد مورد استفاده در این آزمایش شامل آهن (III) کلرید ۶ آبه (FeCl₃.6H₂O)، کبالت (II) کلرید ۶ آبه (CoCl₂.6H₂O)، روی کلرید (ZnCl₂)، و سدیم هیدروکسید (NaOH) بودند که همگی از شرکت مرک خریداری شدند. نانوذرات فریت کبالت-روی مطابق با روش گزارش شده در (Faraji et al., 2019) سنتز شدند.

۳- بحث و نتیجه گیری

طیف پراش پرتو ایکس نمونه سنتزشده در شکل ۱ نشاندهنده ساختار اسپینل مکعبی و تأیید فاز خالص فریت کبالت-روی است. معمولاً در سنتز فریتهای مغناطیسی، فاز ناخواسته هماتیت (آهن اکسید) تشکیل میشود که باعث کاهش خواص مغناطیسی می گردد. اما در نمونه سنتزشده در این پژوهش، این فاز وجود ندارد. برای بررسی توزیع اندازه ذرات، از تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (شکل ۲) استفاده شد که نشاندهنده اندازه میانگین ذرات مناسب برای کاربردهای هایپرترمیا است. آنالیز EDX (شکل ۳) نیز تأیید کرد که عناصر مورد نظر در ساختار نانوذرات حضور دارند. خواص مغناطیسی نمونه با استفاده از مغناطیسسنج ارتعاشی بررسی شد. نمودار شکل ۴ رفتار پارامغناطیسی نمونه را تأیید کرده و مقادیر مغناطیس اشباع برابر با ۶۰ emu/g و وادارندگی اشباع (Hc) برابر با ۸۸/۲۰۸ به دست آمد.

میان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳







شكل۲: تصوير FESEM نانوذرات مغناطيسي فريت كبالت-روي



شكلT: EDX نانوذرات مغناطيسي فريت كبالت- روى



در این مطالعه، نانوذرات فریت کبالت-روی با استفاده از روش هیدروترمال سنتز شدند. نتایج آنالیز میکروسکوپ الکترونی روبشی نشان داد که اندازه ذرات در محدوده ۲۶ تا ۴۱ نانومتر بوده و ساختار آنها کروی است. الگوی پراش پرتو X نیز صحت سنتز و تکفاز بودن ساختار را تأیید کرد. با توجه به مغناطیس اشباع بالای به دست آمده (60 emu/g)، میتوان نتیجه گرفت که این نانوذرات کاندیدای امیدوارکنندهای برای استفاده در فرآیند هایپرترمیا هستند.

منابع و مراجع

- [1] Faraji, S., Dini, G., & Zahraei, M. (2019). Polyethylene glycol-coated manganese-ferrite nanoparticles as contrast agents for magnetic resonance imaging. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 475, 137-145.
- [2] Ge, X., Li, H., Zheng, H., Zheng, P., Zheng, L., & Zhang, Y. (2023). Electromagnetic performance of NiMgCuZn ferrite for hyperthermia application in cancer treatment. ACS omega, 8(19), 16647-16655.
- [3] Patade, S. R., Andhare, D. D., Somvanshi, S. B., Jadhav, S. A., Khedkar, M. V., & Jadhav, K. (2020). Self-heating evaluation of superparamagnetic MnFe2O4 nanoparticles for magnetic fluid hyperthermia application towards cancer treatment. *Ceramics International*, 46(16), 25576-25583.



مطالعه نظریه تابعی چگالی جذب سطحی کربن دی اکسید روی زئولیت M-ABW تبادل شده با کاتیون

روح الله کریمی'، حسین محمدیمنش^{۲و*،} فاطمه پورروستائی اردکانی^۳

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد، (ruhallahkarimi76@gmail.com) ۲ و *- نویسنده مسئول: دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد، (f.pourroustaei.a@gmail.com) ۳-دانشجوی فارغ التحصیل دکتری، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد، (f.pourroustaei.a@gmail.com)

واژگان كليدى: زئوليت Li-ABW، جذب سطحى، كربن دى اكسيد، نظريه تابعى چگالى.

۱– مقدمه

زئولیت Li-ABW یک نوع ماده معدنی متخلخل با ساختار بلوری خاص است که به دلیل ویژگیهای منحصر به فرد خود، به عنوان یک جاذب و کاتالیست در صنایع مختلف مورد استفاده قرار میگیرد. این زئولیت به طور خاص به دلیل توانایی بالای خود در تبادل یون و جذب مولکولهای آب و دیگر ترکیبات، کاربردهای گستردهای در تصفیه آب، جداسازی گازها و بهبود فرآیندهای شیمیایی دارد. مطالعه و بررسی ویژگیها و کاربردهای زئولیت Li-ABW میتواند به توسعه فناوریهای نوین در زمینههای محیط زیست و صنعت کمک شایانی نماید (فلانگن، ۱۹۹۱).

۲- روش

در این پژوهش که با استفاده از نرم افزار کوانتوم اسپرسو انجام گرفت ابتدا پارامترهای محاسباتی بهینه سازی شدند و بعد از آن ساختار زئولیتهای Li-ABW و Na-ABW بهینه شدند. در مرحله بعد با استفاده از نظریه تابعی چگالی جذب گاز CO2 در هر یک از زئولیت ها مورد بررسی قرار گرفت و خواص ساختاری و الکترونی هر یک از این دو زئولیت مورد بررسی قرار گرفت.

۳- بحث

Li-ABW نوعی زئولیت با گروه فضایی Pna2₁، گروه نقطهای C₂V و فرمول تجربی [Li₄(H2O)₄][Li₄(H2O)₄] است که در شبکه اورتورومبیک متبلور میشود . سلول واحد آن دارای ۴۰ اتم شامل اتمهای اکسیژن، آلومینیوم، سیلیسم، هیدروژن و لیتیم و پارامترهای شبکه آن برابر a=10.313، b=8.194 و c=4.993 آنگستروم است. با استفاده از مقاله تجربی آندرسون و سورنسن شکل اولیهی این زئولیت توسط برنامه وستا رسم شده و سپس با استفاده از پارامترهای بهینه شده مرحلهی قبل، با انجام محاسبات آرامش با کمک بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو بهینه شدهاند (پورروستائی اردکانی، ۱۴۰۳). بعد از بهینه سازی ساختار، گاز کربندی اکسید در حفره بزرگ کانال زئولیت جایگذاری شده است. علاوه براین بهینه سازی با تعویض کاتیون نیز انجام شده است و کاتیون لیتیم جایگذاری و بهینه سازی شده است. در ادامه خواص ساختاری و الکترونی جذب گاز کربندی اکسید برای هر دو زئولیت مورد تجزیه و تحلیل قراار گرفته شده است.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

Species	Li-ABW	Na-ABW	Li-ABW-CO ₂	Na-ABW-CO ₂
016.015	2 65441	2 65441	2 60272	2 60272
010-013	3 80830	3.65441	3.86620	3.86620
Li3-O34	-	-	2.01054	-
Na3-O34	-	-	-	2.57687

Na-ABW	Li-ABW و	زئوليتهاي	ای مختلف در	فاصله اتمها	ل ۱– مقادیر	جدو
--------	----------	-----------	-------------	-------------	-------------	-----

همچنین انرژی جذب برای هر دو زئولیت محاسبه شده است.

جدول ۲- انرژی الکترونی و جذب محاسبه شده زئولیت هایgas-M-ABW

Species	E (Ry)	E _{ad} (Ry)	E _{ed} (kJ.mol ⁻¹)
CO ₂ -Li-ABW	-829.1633	-2.9233	-3835.3696
CO ₂ -Na-ABW	-1157.3674	-2.8633	-3756.6496

1Ry =1312KJ.mol⁻¹

در ادامه خواص الکترونی برای هر یک از زئولیتها محاسبه شده است.

جدول ۳- مقادیر انرژی نوار رسانش، ظرفیت و شکاف محاسبه شده زئولیتهای M-ABW-CO2					
Species	$E_{VBM}^{1}(eV)$	$E_{CBM}^{2}(eV)$	$E_g^3(eV)$		
Li-ABW	1.8336	6.5636	4.7300		
Na-ABW	2.1241	6.8471	4.7230		
Li-ABW-CO ₂	2.3935	7.2060	4.8125		
Na-ABW-CO ₂	3.0786	7.7647	4.6861		

با محاسبه خواص الکترونی این نتیجه حاصل میشود که جذب گاز کربندیاکسید در زئولیت با کاتیون لیتیم بهتر از سدیم اتفاق میافتد وعلت آن هم به خاطر شاع کوچکتر لیتیم و همچنین تجمع بار نزدیک به هسته در لیتیم، علاوه بر این مشاهده میشود انرژی شکاف در هر دو زئولیت عددی نسبتا بزرگ را نشان میدهد که میتوان این نتیجه را دریافت کرد زئولیتها تقریبا خاصیتی نیمه عایق دارند که این خاصیت باعث کارایی بالای آنها در صنعت و تکنولوژی میشود.

٤ - نتیجه گیری

این تحقیق به بررسی خواص ساختاری و الکترونی زئولیت M-ABW در حضور کاتیونهای لیتیم و سدیم و گاز کربندیاکسید میپردازد. نتایج نشان میدهد که زئولیت M-ABW دارای کانالهای زیگزاگی است که گازها تمایل به قرارگیری در کانال بزرگتر آن دارند و کاتیونهای لیتیم تعامل قویتری با CO2 نسبت به سدیم دارند. همچنین، زئولیتها خواص نیمهرسانایی و عایق حرارتی دارند که برای کاربردهای ویژه مفید است.

14.1

منابع و مراجع

[1] Flanigen, E. M., Jansen, J. C., & van Bekkum, H. (Eds.). (1991). Introduction to zeolite science and practice. Elsevier.

[2] Pourroustaei-Ardakani, F., Mohammadi-Manesh, H., & Hashemifar, S. J. (2024). Adsorption behavior of hydrogen sulfide in the channels of Li-ABW zeolite: A study using density functional theory. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 130, 108765.



اکسیداسیون کاتالیزوری آنتیبیوتیک سیپروفلوکساسین درحضور اکسنده پرسولفات بر روی اسپینلهای فریت کبالت

مهشید محمودی'*، سیدمهدی موسوی^۲

۱ و *- نویسنده مسئول:دکتری ، شیمی فیزیک، شیمی،دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، (mahshid.mahmoodi94@gmail.com) ۲- دکتری ، شیمی کاربردی، شیمی کاربردی، دانشکده شیمی، دانشگاه کاشان، (moosavi.smahdi@gmail.com)

واژگان كليدى: اكسيداسيون پيشرفته، سيپروفلوكساسين، اسپينل، پراكسيد.

۱–مقدمه

با توسعه صنایع، طیف گستردهای از آلایندههای آلی وارد محیطزیست میشود. در حال حاضر تعداد زیادی دارو برای درمان بیماریها استفاده میشود که به دلیل استفاده گسترده و دفع نادرست آنها در نهایت در فاضلاب ظاهر شده و آبهای سطحی و زیرزمینی را آلوده می کند. سیپروفلوکساسین یک آنتیبیوتیک نسبتاً جدید است که همانند بسیاری از داروها، تجزیه پذیری زیستی پایینی دارد. کارآمدترین روش در حذف آلایندههای دارویی، فوتوکاتالیز و روشهای تصفیه اکسیداسیون پیشرفته است [۲،۲]. در روش اکسیداسیون پیشرفته، از رادیکالهای هیدروکسیل یا سوپراکسید برای اکسیداسیون آلایندهها استفاده میشود. در روشهای اکسیداسیون پیشرفته، از رادیکالهای هیدروکسیل یا سوپراکسید برای اکسیداسیون آلایندهها استفاده میشود. در روشهای اکسیداسیون پیشرفته، استفاده از فلزات یا اکسیدهای فلزی برای فعال کردن اکسیدانها و تولید رادیکال بسیار در روشهای اکسیداسیون پیشرفته، استفاده از فلزات یا اکسیدهای فلزی برای فعال کردن اکسیدانها و حذف آلایندههای دارویی در محیط آبی استفاده شده است [۳،۴]. در این تحقیق سعی بر آن است تا با تهیه نانوکاتالیست با ساختار اسپینل بر پایه فریت، کاتالیست مناسب و مقرون به صرفه با قابلیت فعالسازی پرسولفات در محیط آبی ساختار شود.

۲-روش

در این مطالعه تجربی، اسپینلهای فریت کبالت با ساختار شیمیایی CoFe₂O4 به روش همرسوبی با عوامل رسوب دهنده مختلف و همچنین به روش سلژل تهیه شدند. برای تهیه اسپینلها با رسوب دهنده سدیم هیدروکسید و آمونیاک، ابتدا مقدار مورد نیاز از پیش ماده فلزات در مقدار مشخص آب مقطر در دمای 2° ۷۵ حل شد. سپس محلول قلیایی رسوب دهنده (آمونیاک ۲۳۷ و یا سدیم هیدروکسید ۰/۱ مولار) به محلول فلزات اضافه شد. در روش همرسوبی با اوره، پس از تهیه محلول پیش ماده فلزات در آب مقطر، مقدار اضافی اوره به آن اضافه شده و در حین همزدن شدید دمای محلول را افزایش داده و به مدت ۵ ساعت رفلاکس شد. ذرات جامد بدست آمده با فیلتراسیون جدا شدند.کاتالیزورهای حاصل خشک شده و در دمای 2° ۶۵کلسینه شدند. در روش سلژل برای تهیه اسپینلهای مدنظر مقدارمشخصی از پیشمادهی نیترات فلزات در آبمقطر حل شد. سپس سیتریک اسید جامد به محلول افزوده شد. سوسپانسیون در دمای 2° ۱۰۰ تا تشکیل ژل، حرارت داده شد. ژل حاصل در آون سیپروفلوکساسین در حضور اکسنده پرسولفات بررسی شد. آزمایشهای اکسیداسیون کاتالیزوری در ۱۰۰میلیلیتر محلول دارو با غلظت ppm انجام شد. در هر آزمایش، ۰/۱۹گرم از اسیینلهای تهیه شده و جرم مشخصی ازیتاسیم پرسولفات به آن اضافه شد. سوسپانسون به مدت ۲ ساعت در دمای محیط همزده شد. در زمانهای معین، از این محلول نمونه برداری شده و ذرات کاتالیزور با سانتریفیوژ از آن جدا شد. غلظت داروی باقیمانده در محلول جدا شده از طریق اسپکتروفتومتر UV-visible در طول موج ماکزیمم دارو (۲۷۵ نانومتر) اندازه گیری شد. با استفاده از رابطه زیر درصد حذف دارو R% بدست آمد. در این رابطه به ترتیب غلظتهای دارو در هر زمان و در زمان اولیه هستند. C_0 , C_t معادله

14. 7. 17. 979

 $R\% = C_0 - C_t / C_0 \times 100$

۳-بحث و نتیجهگیری

الگوی XRD در نمونه های آماده شده (شکل۱)، تمام قله ها، به نظر می رسند با فاز اسپینل مطابقت دارند. با توجه به این الگوهای XRD، اسپینل های تهیه شده با روش سلژل ساختار کریستالی همگنتری داشتند. اندازه متوسط ذرات با استفاده از معادله شرر و پیک با بیشترین شدت (۲۵/۵^۰) محاسبه شد و این اندازه تقریباً nm۲۹ بود. مطابق تصاویر SEM اسپینل تهیه شده بصورت ورقههایی با ابعاد μm-۱-۵ دارند. همانطور که در شکل۲مشخص است این ذرات اندازه تقریبی ۵۸nm دارند. مطابق این تصاویر، اسپینل فریت کبالت تهیه شده در عین حال که ورقههای میکرومتری با قابلیت جداسازی راحت از سوسپانسیون را دارند، سطح متخلخل نانومتری برای فرآیند کاتالیزگری را فراهم میکنند.



در شکل۳، بیشینه حذف آلاینده دارویی سیپروفلوکساسین بر روی این اسپینل ۵۱٪ میباشد. مطابق این شکل برتری عملکرد اسپينل فريت كبالت تهيه شده به روش سل ژل در مقايسه با ساير اسپينل هاي فريت كه به روش همرسوبي تهيه شدند به وضوح مشخص شده است. همچنین با مقایسه نتایج حاصل از اسپینلهای تهیه شده به روش همرسوبی، میتوان اظهار داشت که اسپینل کبالت فریت تهیه شده با عامل رسوبدهنده اوره، عملکرد مطلوبتری در بین دو اسپینل دیگر داشت.

۴- نتيجەگىرى

در این مطالعه، کارایی حذف داروی سیپروفلوکساسین با فرآیند اکسیداسیون پیشرفته مبتنی بر رادیکالهای سولفات فعال شده توسط کاتالیزورهای اسپینل CoFe₂O4 به روش همرسوبی و سلژل بررسی شد. و اثر روش تهیه اسپینلها بر ساختار آنها و عملکرد آنها در حذف سیپروفلوکساسین مورد توجه قرار گرفت. با توجه به نتایج بهدست آمده از الگوهای XRD، می توان گفت که سنتز اسپینلها به روش سلژل، ساختار و بلورهای اسپینل مناسبتری را تشکیل میدهد. همچنین با توجه به نتایج



بهدستآمده از آزمایشهای عملکرد کاتالیزوری هر یک از اسپینلها در حذف داروی سیپروفلوکساسین، میتوان نتیجه گرفت که اسپینل فریت کبالت تهیهشده با سلژل عملکرد بهتری نسبت به سایر اسپینلها داشت. با توجه به نتایج، استفاده از اسپینل به عنوان کاتالیزور در فرآیند اکسیداسیون پیشرفته با هزینه کم و راندمان بالا می تواند روش مناسبی برای حذف داروها باشد.

منابع و مراجع

[1] Tsitonaki, A., Petri, B., Crimi, M., Mosbaek, H. A. N. S., Siegrist, R. L., & Bjerg, P. L. (2010). Critical Reviews in Environmental Science and Technology, 40(1), 55-91.

[2] Feng, Y., Liu, J., Wu, D., Zhou, Z., Deng, Y., Zhang, T., & Shih, K. (2015). Chemical Engineering Journal, 280, 514-524.

[3] Robinson, I., Junqua, G., Van Coillie, R., & Thomas, O. (2007). Analytical and bioanalytical chemistry, 387(4), 1143-1151.

[4]_Comninellis, C., Kapalka, A., Malato, S., Parsons, S. A., Poulios, I., & Mantzavinos, D. (2008). Journal of Chemical Technology & Biotechnology, 83(6), 769-776.



مطالعه نظری خواص فوتوفیزیکی کمپلکسهای (Pt(II بر اساس لیگاند بنزوکینولین (bzq) و کاربرد آنها در OLED

بتول مراد پور ۱*، رضا امیدیان ۲.

۱ – دانشجو، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی دانشگاه اصفهان، (bat.moradpour@gmail.com) ۲– دانشیار، شیمی کوانتوم و طیفسنجی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی دانشگاه اصفهان، (romidyan@sci.ui.ac.ir)

واژگان کلیدی: کمپلکسهای پلاتین (II)، لیگاند ۷۰۸- بنزوکینولین (bzq)، دیودهای نورگسیل آلی (OLED)، جفت شدگی اسپین-اوربیت (SOC)، نظریه تابعی چگالی (DFT)، نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان (TD-DFT).

۱– مقدمه

در سالهای اخیر، دیودهای نورگسیل آلی (OLED) به دلیل قابلیتهای بالای خود در نمایشگرها و لامپهای حالت جامد، مورد توجه تحقیقات قرار گرفتهاند. اساس ساختار OLED شامل لایههای نازک از مواد آلی الکترولومینسانس که بین دو الکترون و قرار گرفتهاند میباشد. ساختار این دیودها شامل آند، لایهی انتقال دهندهٔ حفره، لایهی نورگسیل، لایهی انتقال دهندهٔ الکترون و کاتد است^۱. عملکرد OLED بر مبنای بازترکیب جفت الکترون-حفره (اکسایتون) یکتایی و سهتایی در لایه نورگسیل است، که با اعمال ولتاژ، به نسبت ۳ به ۱ تولید میشوند. این امر کارایی آنها را به ۲۵٪ محدود میکند. اما با استفاده از کمپلکسهای فلزات سنگین مانند پلاتین (II) و جفتشدگی اسپین-اوربیت (SOC)، میتوان بازده کوانتومی داخلی را به حدود ۲۰۰ درصد افزایش داد^۲. بنابراین، دستگاههای OLED دوپشده با ترکیبات مهمان دارای خاصیت فسفرسانس در لایه تابش، اهمیت زیادی (bز بهبود کارایی آنها دارند. در این مطالعه، خواص فتوفیزیکی هشت کمپلکس پلاتین (II) بر پایه لیگاند ۲۰۸– بنزوکینولین در بهبود کارایی آنها دارند. در این مطالعه، خواص فتوفیزیکی هشت کمپلکس پلاتین (II) بر پایه لیگاند ۲۰۸– بنزوکینولین

۲- روشهای محاسباتی

در این مطالعه، از نظریه تابعی چگالی (DFT) و نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان (TD-DFT) با تابعی B₃LYP ساختارهای الکترونیکی و خواص فوتوفیزیکی سیستمهای مورد نظر بررسی شده است. از مجموعههای پایه cc-pVDZ و def2-TZVP در بهینهسازی و تعیین پارامترهای فوتوفیزیکی سیستمهای منتخب، با کمک نرمافزارهای Turbomole و ORCA، استفاده شده است.

۳- بحث و نتیجهگیری

خواص فسفرسانس سیستمهای منتخب بررسی شد و نتایج محاسباتی و تجربی در جدول شماره ۱ ارائه شده است. بازده کوانتومی فسفرسانس (Φ_p) در OLEDها با استفاده از ثابتهای سرعت آسایش تابشی و غیر تابشی (Φ_p) در $\Phi_p = \frac{k_r}{k_r + k_{nr}}$

همچنین k_r و k_n با کمک معادلات زیر محاسبه می شوند^۳:



والسكاد اصفيان ٢٩ و ٢٠ آيان ١٤٠٣

که در این معادلات ($[T_n]$ انرژی انتقال از حالت برانگیخته سهتایی T_n به حالت پایه S_0 است و $(R_n]H_{SOC}|S_n)$ نارژی انتقال از اولین حالت ماتریس جفتشدگی اسپین-اوربیت (SOC) را نشان میدهند. همچنین، f_n قدرت نوسانگر و (R_n) انرژی انتقال از اولین حالت برانگیخته یکتایی R_n به S_n اسپین-اوربیت (SOC) را نشان میدهند. همچنین، f_n قدرت نوسانگر و (R_n) انرژی ا T_n کوچکتر به q_0 است و رازگیخته یکتایی R_n به S_n را بیان می کند. پارامتر q مقدار ثابت و مرتبط با خمیدگی ساختاری بین حالتهای T_n و S_0 است و (R_n) (SOC) بین دو حالت متناظر را مشخص می کند. همچنین، شکاف انرژی T_n کوچکتر به q بیشتر Φ_n میشتر در (T_n) شکاف انرژی بین دو حالت متناظر را مشخص می کند. همچنین، شکاف انرژی (T_n) کوچکتر به q بیشتر منجر می شود. نتایج نشان داد که خواص نشر فسفرسانس برای تمامی کمپلکسها با نتایج تجربی آنها همخوانی دارد و این N_n (S_n) منجر می شود. نتایج نشان داد که خواص نشر فسفرسانس برای تمامی کمپلکسها با نتایج تجربی آنها همخوانی دارد و این N_n (S_n) منجر می شود. نتایج نشان داد که خواص نشر فسفرسانس برای تمامی کمپلکسها با نتایج تجربی آنها همخوانی دارد و این N_n (S_n) می در محدوده T_n (S_n) می کند. همچنین بالاترین مقادیر M_n مربوط به کمپلکسهای N_n (S_n) مربوط به کمپلکسهای N_n (S_n) مربوط به کمپلکسهای N_n (S_n) مربوط به مربوط به محوانی دارد و این N_n (S_n) مربوط به مربوط به مربوط به کمپلکسهای N_n (S_n) مربوع (N_n) (S_n) و N_n (S_n) مقادیر به T_n (S_n) می اند N_n (S_n) مربوط به مربوط به کمپلکسهای N_n (S_n) می در حالی که برای N_n (S_n) مقادیر باین در N_n (S_n) (S

جدول ۱: a، دادههای تجربی در حالت جامد. بازده کوانتومی فسفرسانس (Φ_P) هشت کمپلکس در سطح تئوری TD-DFT (نتایج معادلات ۱، ۲ و ۳).

ساختار	M%	SOC (cm ⁻¹)	fn	ΔE_{S1-T1}	$E_{T1-p}(eV)$	$k_r \times 10^3 (s^{-1})$	$k_{nr} \times 10^3 (s^{-1})$	\varPhi_{p} (%)
١	40.1	92.34	0.029	0.63	2.28	1.52	1.367	52.63/ (0.17) ^a
٢	35.7	47.63	0.036	0.63	2.35	0.547	1.171	31.83
٣	11/8	25.52	0.075	0.40	1.83	$0.517/(3.5 \times 10^5)^{a}$	3.470/(4.5×10 ⁵) ^a	12.96/ (0.43) ^a
۴	17.3	35.72	0.022	0.38	1.84	$0.270/(3.2 \times 10^5)^{a}$	3.427/(11.1×10 ⁵) ^a	7.30/ (0.22) ^a
۵	29.7	46.66	0.060	0.53	2.23	$1.09/(0.34 \times 10^5)^{a}$	1.526/(6.7×10 ⁵) ^a	41.64
۶	23.4	51.03	0.035	0.50	2.22	0.718	1.561	33.34
Y	21.7	43.74	0.047	0.51	2.20	0.742	1.600	31.67
٨	41.4	51.03	0.058	0.51	2.23	1.29	1.526	45.80



منابع و مراجع

[1] Geffroy, B., Le Roy, P., & Prat, C. (2006). Organic light-emitting diode (OLED) technology: materials, devices and display technologies. *Polymer international*, 55(6), 572-582.

[2] Wang, L., Wu, Y., Shan, G. G., Geng, Y., Zhang, J. Z., Wang, D. M., ... & Su, Z. M. (2014). The influence of the diphenylphosphoryl moiety on the phosphorescent properties of heteroleptic iridium (III) complexes and the OLED performance: a theoretical study. *Journal of Materials Chemistry C*, 2(16), 2859-2868.

[3] Haneder, S., Como, E. D., Feldmann, J., Lupton, J. M., Lennartz, C., Erk, P., ... & Molt, O. (2008). M€ unster, I.; Schildknecht, C.; Wagenblast, G. Adv. Mater, 20, 3325-3330.



مطالعه ساختار کمپلکس مس(II) ۳،۱–دی(۲–پیریدیل) پروپان–۳،۱–دیاُن با استفاده از نظریه تابعی دانسیته

آرزو مرادی^۱ ، عبدالرضا نکوئی^{۲*}

۱ – دانشجوی دکتری، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز،ar.moradi@sutech.ac.ir ۲ و *- نویسنده مسئول: دانشیار، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز،nekoei@sutech.ac.ir

واژگان كليدى: بتا-دىكتون، كمپلكس فلزى، NBO، مالا

۱– مقدمه

کمپلکسهای β-دیکتون، بهویژه استیل استوناتهای فلزی، به دلیل ساختار منحصربهفرد خود دارای خواص ویژهای هستند. این کمپلکسها در صنعت و علم کاربردهای متعددی دارند؛ ازجمله بهعنوان اصلاح کننده خواص پلیمرها، کاتالیزورهای واکنشها (مانند اکسیداسیون الفین)، و ترکیبات دارویی فعال (Kołodziejczak-Radzimska, 2014). همچنین، آنها در تجزیه و تحلیل شیمیایی، پایش آلودگی، افزودنیهای سوخت، و درمان بیماریهای ریوی و دیابت مورد استفاده قرار می گیرند(2019, 2019). هدف این مطالعه بررسی ساختار، استحکام پیوند فلز-لیکاند و پایداریهای ساختاری می گیرند(2019-پیریدیل)پروپان-۳۰۱-دیاُن مس (20(dppd)) با استفاده از محاسبات نظریه تابعی دانسیته (DFT) است. نتایج بهدستآمده با کمپلکسهای مشابه در سطح محاسباتی یکسان مقایسه خواهد شد. تاکنون، گزارشی از ساختار نظری برای کمپلکس 20(dppd) در مقالات موجود نیست.



شکل ۱: پایدار ىرىن ساحتار بهينه سدهى تمپلحس 2(dppa

۲- روش

تمامی محاسبات در مطالعه حاضر با استفاده از بسته نرمافزاری Gaussian 09W، 5.0 و AIM 2000 و AIM انجام شده است. کانفورمرهای Cu(dppd)₂ در سطح B3LYP با استفاده از مجموعه پایه (b)311G(d) مورد بررسی قرار گرفتهاند. از آنجایی که نتایج قابل قبولی برای کمپلکسهای مشابه در سطح B3LYP/6-311G(d) گزارش شده است، این سطح محاسباتی در این مطالعه به کار گرفته شده است. علاوه بر تجزیه و تحلیل جمعیتی اوربیتالهای پیوندی طبیعی، پارامترهای توپولوژیکی دانسیته الکترونی و لاپلاسین آن در نقاط بحرانی پیوندهای Cu-O با کمک برنامه AIM 2000 و بر اساس نظریه بیدر محاسبه شدهاند.

دانيكاه اصفهان ٢٩ و ٣٠ بان ١٤٠٣

۳- بحث و نتایج

از لحاظ نظری، با در نظر گرفتن چرخش گروههای پیریدین در 2(udppd) که دارای تقارن ۲۵ است، ۲ کانفورمر با تقارنهای مختلف ایجاد می شوند. پایدار ترین ساختار مولکولی بهینه شده برای 2(Cu(dppd) که دارای تقارن Ci است، در شکل ۱ نشان داده شده است. پارامترهای هندسی محاسبه شده برای این ترکیب و همچنین برای 2(uaca) ی 2(uacac) و 2(udbm) به منظور مقایسه، در جدول ۱ فهرست شده اند. طول پیوند O-D و فاصله O···O در 2(udpd) نسبت به 2(udbm) بلندتر، و نسبت به 2(udbm) کوتاه تر است. این نتایج نشان دهنده تشکیل پیوند قوی تر بین فلز و لیگاند و درنتیجه کمپلکس پایدار تر بین (II) و bpd در مقایسه با کمپلکس بین (II) و عمعه است. همچنین نتایج نشان می دهند که کمپلکس مورد مطالعه از کمپلکس 2(udbm) بر اساس طیف سنجی IR، نشان دادند که ترتیب پایداری کمپلکس های فلزی مس به شکل زیر است: bbac محمد است.

	Cu(dppd) ₂	Cu(dbm) ₂	Cu(acac) ₂
Cu-O bond distance (Å)	1.923	1.919	1.925
O…O distance (Å)	2.767	2.754	2.769
Cu–O bond order	0.178	0.178	0.175
C-O bond order	1.342	1.349	1.355
C-C bond order	1.349	1.338	1.341
Cu atomic charge (e)	1.412	1.412	1.397
ρ _{вср}	0.0898	0.0905	0.0894
$\nabla^2_{\rm BCP}$	-0.1271	-0.1288	-0.1256

جدول ۱: یارامترهای هندسی و نتایج NBO و AIM محاسبه شده در سطح نظری (B3LYP/6-311G(d

تجزیه و تحلیل NBO و مرتبه پیوندی Wiberg که در جدول ۱ ارائه شده است، نیز نتایج بهدستآمده را تأیید مینمایند. مقایسه مراتب پیوندی C-C و C-O در جدول ۱ نشان دهنده وجود پیوندهای رزونانسی در حلقه کیلیتی کمپلکسهای مورد مقایسه است. نتایج تجزیه و تحلیل AIM در نقاط بحرانی پیوندهای Cu-O نیز در جدول ۱ ارائه شدهاند. مشاهده می شود که این پارامترهای توپولوژیکی در 2u(dppd) کمتر از 2u(dbm) و بیشتر از 2cu(acac) هستند. این موضوع نیز نشاندهنده ی ضعیفتر بودن پیوندهای Ou-C در 2u(dppd) نسبت به 2u(dbm) و قوی تر بودن آنها در مقایسه با 2u(acac) است.

۴- نتیجهگیری

نتایج نشان میدهند که پیوندهای Cu-O در Cu(dppd)2 ضعیفتر از Cu(dbm)2 اما قوی تر از Cu(acac)2 هستند. وجود پیوندهای رزونانسی در حلقه کیلیتی، و همچنین بین گروههای فنیل/پیریدین با حلقه کیلیتی، تأثیر قابل توجهی بر پارامترهای هندسی و پایداری کمپلکسها دارد. بهطورکلی، ترتیب پایداری کمپلکسهای فلز مس (II) با لیگاندهای مورد بررسی بهصورت dbm > dppd > acac تأثیر میشود.



منابع و مراجع

- Kołodziejczak-Radzimska, A., & Jesionowski, T. (2014). Zinc oxide—from synthesis to application: a review. Materials, 7(4), 2833-2881.
- [2] Khamidullina, L. A., Puzyrev, I. S., Glukhareva, T. V., Shatunova, S. A., Slepukhin, P. A., Dorovatovskii, P. V., ... & Pestov, A. V. (2019). Synthesis, characterization, DFT calculations, and biological activity of copper (II) complexes with 1, 1, 1-trifluoro-4-(2-methoxyphenyl) butan-2, 4-dione. Journal of Molecular Structure, 1176, 515-528.
- [3] Nakamoto, K. (2009). Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds, part B: applications in coordination, organometallic, and bioinorganic chemistry. John Wiley & Sons.



Y - حرکت تقدیمی (Precesion) مطابق قوانین الکترومغناطیس هنگامی که یک بردار مغناطش در یک میدان مغناطیسی قرار می گیرد، از طرف میدان گشتاوری به آن وارد می شود که با رابطهی زیر داده می شود: (۱) که در آن \vec{B} میدان مغناطیسی، \vec{M} بردار مغناطش و $\vec{\tau}$ گشتاور وارد شده است. این گشتاور همواره بر بردار مغناطش عمود است و باعث تغییر در تکانه زاویهای می گردد، از آنجا که تکانه زاویهای و مغناطش متناسب هستند، خواهیم داشت:

ضریب ژیرومغناطیس در بسیاری از معادلات مربوط به طیفسنجی تشدید مغناطیسی هسته ظاهر نمی شود، و شاید به همین جهت مسئلهی تعیین علامت ضریب ژیرومغناطیس کمتر مورد توجه متخصصین طیفسنجی تشدید بوده است (Levitt, Levitt, مسئلهی تعیین کنندهی تقویت شدن و یا تضعیف شدن 2007). در اثر اورهاوزر (Overhauser effect) علامت ضریب ژیرومغناطیس اهمیت دارد. در هر صورت از آنجا که این علامت یکی

از خواص ذاتی یک هسته شمرده می شود در فیزیک ذارت دارای اهمیت است (Klein, 1957).

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{B}$$
(7)

بر مبنای معادلهی بالا بردار آهنگ تغییرات مغناطش در هر لحظه بر خود بردار مغناطش عمود است. در نتیجه بردار مغناطش میبایست حول محور $ec{B}$ دوران کند که حرکت تقدیمی نامیده میشود. حرکت تقدیمی یک بردار مغناطش با ضریب ژیرومغناطیس مثبت حول محور $ec{B}$ در شکل (۱) نشان داده شده است.



۳- میدان مغناطیسی متناوب و برانگیختگی اسپین هسته

در طیف سنجی تشدید مغناطیسی هسته از یک میدان مغناطیسی متناوب برای برانگیختگی اسپینها استفاده میشود که بسامدی برابر با بسامد لارمور هستهی مورد نظر دارد. به دلایل فنی در اغلب موارد این میدان مغناطیسی به طور خطی نوسان میکند که میتوان آن را ترکیبی از دو میدان متناوب چرخان دانست خلاف جهت یکدیگر در حال چرخش هستند. اما تنها جهت چرخش یکی از این دو میدان با حرکت تقدیمی بردار مغناطش یکسان است. بنابراین تنها همین مولفه باعث برانگیختگی شده و مولفهی دیگر تاثیر خاصی روی بردار مغناطش نخواهد داشت.



شکل ۱ : حرکت تقدیمی بردار مغناطش با ضریب ژیرومغناطیس مثبت حول بردار میدان مغناطیسی. واضح است که در صور تی که ضریب ژیرومغناطیس منفی باشد جهت حرکت تقدیمی معکوس خواهد بود.

در برخی از طیفسنجها (MRI scanners) و یا دستگاههای تصویربرداری (MRI scanners) قابلیت استفاده از پرابهای قطبیده (مانند birdcage coil) وجود دارد. بر خلاف پرابهای عادی، این پرابها تنها یک مولفه از دو مولفهی میدان مغاطیسی چرخان را تولید میکنند. در صورتی که جهت چرخش این مولفه با جهت حرکت تقدیمی یکسان باشد برانگیختگی اسپینی رخ داده و سیگنال مشاهده می گردد و در غیر این صورت هیچ سیگنالی دریافت نمی گردد. این مطلب اساس کار ما برای تعیین جهت حرکت تقدیمی و تعیین علامت ضریب ژیرومغناطیس خواهد بود.

۴- بحث و نتیجهگیری

در طیفسنجی تشدید مغناطیسی در صورتی که از یک میدان مغناطیسی متناوب خطی برای برانگیختگی اسپینها استفاده گردد، فارغ از علامت ضریب ژیرومغناطیسی و جهت میدان مغناطیسی ایستا در تمامی حالات، اسپینها برانگیخته شده و سیگنال مشاهده میشود. اما اگر از یک میدان مغناطیسی متناوب چرخان استفاده کنیم برانگیختگی تنها در صورتی رخ خواهد داد که جهت چرخش میدان متناوب با حرکت تقدیمی بردار مغناطش یکسان باشد. در این کار با دانستن جهت میدان مغناطیسی اصلی در یک دستگاه تصویر برداری و همچنین با دانستن جهت چرخش میدان در یک پراب قطبیده از نوع قفس پرنده، جهت حرکت تقدیمی و علامت ضریب ژیرومغناطیس برای پروتون تعیین گردید.


منابع و مراجع

[1] Abragam, A. (1983). Principles of Nuclear Magnetism. Oxford university press.

[2] Levitt, M. H. (2007). Spin Dynamics. John Wiley & Sons.

[3] Klein, M. P., and Holder B. E. (1957). Determination of the Sign of the He³ Nuclear Magnetic Moment. Physical Review. 106, 837.

[4] Source of the picture: courtesy of Allen D. Elster, adopted from: http://mriquestions.com



امکانسنجی شناسایی برخی عناصر فلزی دانهٔ برنج با استفاده از طیفسنجی جرمی زمان پرواز-واجذب یونش لیزری

رؤیا مردانیان دهکردی ^۱، حسین فرخ پور^{۲*}

۱ – کارشناسی ارشد، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان r.mardaniand@gmail.com ۲ و * – استاد، رشته ی شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان h-farrokh@iut.ac.ir

واژگان كليدي: طيفسنجي جرمي، آناليز عنصري، عناصر فلزي، برنج خوراكي، شناسايي كيفي

۱- مقدمه

برنج از پرمصرفترین مواد غذایی در سراسر جهان است. دانههای برنج سرشار از ترکیبات مختلف از جمله کربوهیدراتها، پروتئینها، ویتامینها، قند و عناصر معدنی هستند. برخی از این عناصر معدنی از جمله آهن و روی برای سلامت بدن انسان ضروری هستند اما برخی دیگر از این عناصر مانند کادمیوم، آرسنیک و کروم که از طریق کودهای کشاورزی یا آب و خاک آلوده به محصولات کشاورزی منتقل میشوند، باعث اختلال در عملکرد صحیح بدن میشوند. بنابراین دستیابی به یک روش سریع، آسان و مطمئن برای شناسایی و اندازه گیری این عناصر در محصولات غذایی از جمله برنج ضروری است. اغلب از -ICP آسان و مطمئن برای شناسایی و اندازه گیری این عناصر در محصولات غذایی از جمله برنج ضروری است. اغلب از -ICP آسان و مطمئن برای شناسایی و اندازه گیری این عناصر در محصولات غذایی از جمله برنج ضروری است. اغلب از -ICP آسان و مطمئن برای شناسایی و اندازه گیری این عناصر در محصولات غذایی از جمله برنج ضروری است. اغلب از -ICP آسان و مطمئن برای شناسایی و اندازه گیری این عناصر و ترکیبات موجود در برنج استفاده میشود Wang ; ICP-OES (CP-OES MS) این روش ها نیاز به مراحلی برای آماده سازی نمونه دارند که اغلب زمان بر بوده و از نظر زیست محیطی سبز (Dass, 2006) در این پژوهش از طیفسنجی جرمی زمان پرواز- واجب یونش لیزری (Dass, 2006) برای شناسایی کیفی عناصر فلزی موجود در دانههای برنج لنجان استفاده شده است.

۲- روش

برای ثبت طیف جرمی از طیفسنج جرمی زمان پرواز – واجب یونش لیزری ساخته شده در دانشکدهٔ شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان استفاده شد (Tabrizchi et al., 2014). در این دستگاه، نمونهٔ آماده شده درون محفظهٔ یونش قرار گرفته و اتمها و مولکولهای نمونه تحت تأثیر تابش لیزر به یون تبدیل میشوند. این یونها در اثر اعمال یک ولتاژ مثبت وارد تجزیه گر زمان پرواز شده و براساس نسبت جرم به بارشان در زمانهای مختلف به آشکارساز رسیده و شناسایی میشوند. برای آماده سازی نمونهٔ برنج برای انجام طیف سنجی جرمی از سه روش مختلف شامل انحلال برنج در آب، هضم اسیدی برنج و ساخت یک قرص از پودر برنج استفاده شد و طیف جرمی هر نمونه با تابش فروسرخ، مرئی و فرابنفش ثبت گردید.

۳- نتايج و بحث

طیفهای جرمی ثبت شده با تابش مرئی از نمونهٔ برنج آماده شده با سه روش مختلف در شکل ۲ ارائه شده است. پیک مربوط به T^+ (T^+ (T^+ (T^+ (T^+) و T^+ (T^+ (T^+) و T^+ (T^+) و T^+ (T^+) مربوط به سه ایزوتوپ کروم با شدتی متناسب با درصد فراوانی آنها در این طیف مشاهده می شود. وضوح و قدرت تفکیک یعیک مربوط به سه ایزوتوپ کروم با شدتی متناسب با درصد فراوانی آنها در این طیف مشاهده می شود. وضوح و قدرت تفکیک طیف ثبت شده از برنج هضم شده در اسید بیشتر از دو طیف دیگر است. پیک مربوط به سه ایزوتوپ (T^+ (T^+) (T^+) و T^+ (T^+) و T^+) و T^+ (T^+) و T^+ (T^+) و T^+) و T^+ (T^+) و T^+) و T^+ (T^+) و T^+) و T^+ (T^+) و T^+) و T^+ (T^+) و T^+) و T^+ (T^+) و T^+) و T^+ (T^+) و T^+) و T^+) و قرص برنج شدت کمی دارند. علاوه بر این، در طیف ثبت شده از برنج هضم شده در اسید، پیک مربوط به این ایزوتوپ (T^+) T^+) و T^+) و T^+) و T^+) و قرص برنج شدت کمی دارند. علاوه بر این، در طیف ثبت شده از برنج هضم شده در اسید، پیک مربوط به T^+) و T^+) و T^+) و T^+) و T^+) و تر (T^+) و T^+) و قرص برنج شدت کمی دارند. علاوه بر این، در طیف ثبت شده از برنج هضم شده در اسید، پیک مربوط به T^+) و T^+) و قرص برنج شده است و ایزوتوپ T^+) و $T^$



شکل ۱ : طیف جرمی ثبت شده از برنج محلول در آب (آبی)، برنج هضم شده در اسید (قرمز) و قرص برنج (سبز) با نور مرئی

۴-نتیجهگیری

Na, Mg, Al, K, Ca Mn Cu, Fe نتایج نشان میدهد که روش DDI-TOF-MS روش مناسبی برای شناسایی عناصر Na, Mg, Al, K, Ca Mn Cu, Fe و Zn و راد و Cr, و Zn در برنج خوراکی است. همچنین مشخص شد که آمادهسازی نمونه تأثیر زیادی بر الگوی طیف جرمی دارد و آمادهسازی نمونه بهصورت قرص و استفاده از تابش مرئی به عنوان منبع یونش به دلیل سهولت در تهیهٔ نمونه و شناسایی عناصر بیشتر در طیف جرمی، بهترین انتخاب برای شناسایی عناصر فلزی با استفاده از روش IDI-TOF-MS است.



منابع و مراجع

- [1] Wang, K. M., Wu, J. G., Li, G., Zhang, D. P., Yang, Z. W., & Shi, C. H. (2011). Distribution of phytic acid and mineral elements in three indica rice (Oryza sativa L.) cultivars. *Journal of Cereal Science*, 54(1), 116– 121.
- [2] Jorhem, L., Åstrand, C., Sundström, B., Baxter, M., Stokes, P., Lewis, J., & Grawé, K. P. (2008). Elements in rice on the Swedish market: Part 2. Chromium, copper, iron, manganese, platinum, rubidium, selenium and zinc. Food Additives and Contaminants - Part A Chemistry, Analysis, Control, Exposure and Risk Assessment, 25(7), 841–850.
- [3] Dass, C. (2006). Fundamentals of Contemporary Mass Spectrometry. In *Fundamentals of Contemporary Mass Spectrometry*. Wiley-Interscience.
- [4] Tabrizchi, M., Farrokhpour, H., Abyar, F., Azad, H., Mirian, M., & ILbeigi, V. (2014). Design, construction and calibration of a laser ionization time-of-flight mass spectrometer. *Physical Chemistry Research*, 2(2), 202–216.





پيريميدين

حميد رضا مسعودي الله، ستوده باقرى ، فاطمه خسروى زرندى "

۱ و *- نویسنده مسئول: دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان،h.r.masoodi@vru.ac.ir

۲- دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان، s.bagheri@vru.ac.ir ۳- کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

واژگان كليدى: ساختار شبكه اى، بنزن، پيريميدين، پيوندهيدروژنى، اثر استخلاف، اثر مشاركتى

۱– مقدمه

مطالعه شبکههای حلقوی متشکل از مولکولهایی که از طریق پیوند هیدروژنی به یکدیگر متصل شده اند امروزه از اهمیت بسزایی برخوردار است [1]. کاربرد این شبکه ها در زمینه های مختلفی از جمله جذب گازها، جداسازی هیدروکربن ها و شناسایی مولکولی به اثبات رسده است [2]. جهت گیری و قدرت پیوندهای هیدروژنی تشکیل شده در بین مونومرهای مختلف، چارچوب کلی این شبکه ها و میزان پایداری آنها را تعیین می کند [3]. در این پژوهش، پایداری و خواص الکترونی یک ساختار شبکه ای شش ضلعی ناشی از خود تجمعی بنزن و پیریمیدین استخلاف دار بصورت نظری مورد تحقیق قرار می گیرد.

۲- روش های محاسباتی

ساختارهای اولیه این ترکیبات با استفاده از نرمافزار Gauss View به دست آمده و سپس بهینه سازی ساختاری در سطح CN C₂H₅, CH₃ روی کمپلکسهای X-pyrimidine...Benzene که X شامل استخلاف های NBO, و SALYP/6-311++G(d,p) و NBO نیز بر روی H, F, Cl, و C(CH₃)3 است، با استفاده از نرم افزار Gaussian09 انجام شده است. محاسبات AIM و NBO نیز بر روی ساختارهای بهینه شده انجام گرفته است.

۳- بحث و بررسی نتایج

در شکل ۱ ساختار کمپلکس دو جزئی و شبکه شش ضلعی مورد مطالعه نشان داده شده است. در جدول ۱ نیز برخی از X- X و شبکه شد و جزئی و شبکه شش جزئی N...H در کمپلکس دو جزئی و شبکه شش جزئی V- N در کمپلکس دو جزئی و شبکه شش جزئی - N... ام در کمپلکس دو جزئی و شبکه شش جزئی V- V مربوط به pyrimidine...Benzene درج شده است. کمترین و بیشترین مقادیر طول پیوند های هیدروژنی به ترتیب مربوط به استخلافهای الکترون دهنده و الکترون کشنده در موقعیت متا میباشد. همچنین، طول پیوند های هیدروژنی به ترتیب مربوط به استخلافهای الکترون دهنده و الکترون کشنده در موقعیت متا میباشد. همچنین، طول پیوند موزنی H... در سیستم شش جزئی بیشتر از سیستم دو جزئی است. از مینده در موقعیت متا میباشد. همچنین، طول پیوند های میدروژنی H... در سیستم استخلافهای الکترون دهنده و الکترون کشنده در موقعیت متا میباشد. همچنین، طول پیوند های میدروژنی H... در سیستم از و جزئی ضعیفتر است. از دو جزئی به ترتیب نیز مربوط به استخلافهای الکترون دهنده و الکترون کشنده در موقعیت متا میباشد. میبوند هیدروژنی H... در سیستم شن جزئی ضعیفتر است استخلافهای الکترون دهنده و الکترون کشنده در موقعیت متا میباشد. همچنین، طول پیوند هیدروژنی H... در سیستم شش جزئی ضعیفتر شد جزئی بیشتر از سیستم دو جزئی است. به عبارتی انتظار داریم پیوند هیدروژنی H... در سیستم شن جزئی ضعیفتر از دو جزئی باشد. بیشترین مقادیر انرژی تشکیل کمپلکس (Δ) به ترتیب نیز مربوط به استخلافهای الکترون دهنده از دو جزئی باشد.

و الکترون کشنده میباشد. همانطور که در شکل ۱ ب) مشاهده می شود هر جزء در این سیستم در تشکیل دو پیوند هیدروژنی مشارکت میکند. برای پیشبینی اینکه این برهمکنشها موجب تقویت یا تضعیف یکدیگر میشوند از کمیتی به نام انرژی مشارکتی که در سیستم شش جزئی مورد مطالعه بصورت زیر تعریف میگردد، استفاده میشود:

دانسگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ تارین ۱۴۰۳

 $E_{coop} = \Delta E_{Hexagonal} - 6\Delta E_{dyad}$

مقادیر E_{coop} در حضور همهی استخلافها صرفنظر از ماهیت آنها دارای علامت مثبت است. بنابراین نسبت به سیستمهای دو جزئی انتظار داریم که قدرت پیوند هیدروژنی در سیستمهای شش جزئی کاهش پیدا کرده باشد که البته این روند در حضور استخلاف های الکترون دهنده شدیدتر است.



شکل ۱. کمپلکس های الف) دو جزئی و ب) شش جزئیX-pyrimidin...Benzene که گلولههای سبز نشان دهندهی استخلافهای X میباشند.

جدول ۱. پارامترهای ساختاری، انرژی و مکان شناختی در کمپلکس های دو جزئی و شش جزئی X-pyrimidin...Benzene . اعداد درشت مربوط به کمپلکس های شش جزئی است.

Х	ΔΕ	d (N H)	$ ho_{HB} imes 10^3$	E eml	E ⁽²⁾	Ecoop
$C(CH_3)_3$	_٣/۶٣ ,-١٨/٧۴	۲/۶۸۷, ۲/۷۳۰	7/31, 6/73	-۴/۵۴,-۴/۲۰	۵/۴۸,4/73	٣/•۶
C ₂ H ₅	-٣/۶٠, -١٨/٩ ۶	۲/۶۹۲, ۲/۷۳۳	٧/٢٣,۶/٨٨	-۴/۵۰,-۴/۲۹	۵/۴۴ ,۴/۶۹	۲/۶۲
CH ₃	-٣/۶۵,-١٨/۶٠	۲/۲۰۰,2/737	۷/۱۳, ۶/۶۳	-۴/۴۴,-۴/۱۴	۵/۳۱ ,۴/۶۹	٣/٢٩
Н	_٣/٣٨, -١٧/٨٠	۲/۲۰۱,2/749	۲/۱۰,۶/۵۰	-۴/۴۳,-۴/•۷	۵/۱۹,۴/۴۸	۲/۴۸
F	-۲/۹۱, -۱۵/۶۱	٢/٧٤٧,2/783	8/48,8/03	-۴/•Y, - ۳/ ۸ •	4/07, 4/•7	۱/٨۶
Cl	_۲/۹۳ ,-1۶/۳۴	۲/۷۴۸,2/776	8/44,8/19	-۴/•۵,-۳/٩•	4/44, 4/+1	۱/۲۵
CN	-۲/۲۹ ,-۱۲/۰۴	٢/٧٨٧,2/827	۵/۹۵,۵/۵۹	-۳/٧۶,-۳/۵۴	٣/٧٧,٣/۴٣	١/۶٨

مقادیر E_{EML} ،ρ_{HB} و E_{EML} ⁽²⁾ که از محاسبات AIM و NBO استخراج می شوند نشان میدهند که مشابه سیستمهای دو جزئی با افزایش قدرت الکترون دهندگی استخلافها، قدرت پیوند هیدروژنی افزایش مییابد. همچنین، مشخص میگردد که در توافق با مقادیر مثبت انرژی مشارکتی، قدرت پیوند هیدروژنی در حضور هر استخلاف در سیستمهای شش جزئی کمتر از سیستمهای دو جزئی است.

۴- نتیجه گیری

نتایج نشان می دهند که که یک رابطه مستقیم بین قدرت الکترون دهندگی استخلافها و میزان پایداری کمپلکسهای دو جزئی و ششجزئی وجود دارد. همچنین، پارامترهای انرژی، ساختاری و مکان شناختی نشان می دهند که پیوند هیدروژنی N...H در کمپلکسهای ششجزئی نسبت به کمپلکسهای دوجزئی ضعیف تر است.

14.17.111.7979.11

منابع و مراجع

[1] Chen, L., Zhang, B., Chen, L., Liu, H., Hua, Y., Qiao, Sh. (**2022**). Hydrogen-bonded organic frameworks: design, applications, and prospects. Materials Advances, 3, 3680-3708.

[2] Song, J.H., Jeon B.H., Kang D.W. (**2024**). A highly stable hydrogen-bonded organic framework for hydrogen storage. CrystEngComm, 26, 2342-2345.

[3] Hema, M.K., Renganathan, R.R., Rajabathar, J.R., Chethana M.H., Eltayeb, M.A., Lokanath, N.K., Mallu, P. (**2025**). 2D hydrogen bonded organic framework (2D-HOF) in benzodioxane-coupled-pyridine as a charge carrier: Synthesis, structural, quantum computational investigation. Journal of Molecular Structure, 1321, 139633.



تأثیر یونهای ⁺Cu و ^{+C}u بر پایداری جفتشدگی زانتین- اوراسیل: یک مطالعه نظری

حمید رضا مسعودی (*، ستوده باقری ۲، مهدیه رحیمی نژاد ۳

۱ و *- نویسنده مسئول: دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان، h.r.masoodi@vru.ac.ir ۲- دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان، s.bagheri@vru.ac.ir ۳- کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

واژگان کلیدی: زانتین، اوراسیل، جفتشدگی غلط، توتومریزاسیون، یونهای ⁺Cu²، نظریه تابعی چگالی

۱– مقدمه

زانتین به عنوان یک حد واسط در تولید داروهای انسانی و حیوانی نقش بسیار مهمی در شکل گیری باکتریهای پرو بیوتیک دارد و به عنوان آفت-کش مورد استفاده قرار می گیرد[۱]. این باز بهطور بالقوه جهشزا بوده و میتواند باعث ایجاد جفتشدگی غلط در رشتههای DNA و RNA شود [۲]. اثرات یون-های فلزی بر خواص و پایداری بازهای نوکلئوتیدی نیز مورد توجه ویژه ای قرار گرفته است [۳]. بر اساس دانش ما، تأثیر یون های ⁺Cu و ⁺²Cu بر جفتشدگی غلط زانتین- اوراسیل مورد بررسی قرار نگرفته است که در این پژوهش به صورت نظری مورد مطالعه قرار می گیرد.

۲- روش های محاسباتی

ساختارهای اولیه این ترکیبات با استفاده از نرمافزار Gauss View به دست آمده و سپس بهینه سازی ساختاری در سطح UM06-2X /6-311++G(d,p) با استفاده از نرم افزار Gaussian09 انجام شده است. در طی فرآیند بهینهسازی هیچگونه محدودیت تقارنی در نظر گرفته نشده است. محاسبات فرکانس در سطح ذکر شده انجام گرفته و عدم وجود فرکانسهای موهومی نشاندهنده این است که ساختارهای مورد نظر پایدار و کمینه هستند.

۳– بحث و بررسی نتایج

زانتین و اوراسیل دارای فرمهای توتومری غالب دی-کتو و فرمهای نادر کتو-انول میباشند. در اینجا برای نشان دادن فرم توتومری نادر مولکولها از علامت * استفاده شده است. در شکل ۱ مشاهده می شود این بازها در ساختارهای توتومری مختلف از طریق پیوندهای هیدروژنی با یکدیگر جفت می شوند. در اینجا، جفت شدگیهای غلط زانتین-اوراسیل هنگامی که ⁺Cu و ²⁺Cu²⁺ موقعیت N3 به زانتین متصل است، مورد مطالعه قرار گرفتهاند. انرژی تشکیل در جفت شدگیهای غلط (Cu²⁺ or) (²⁺-Cu²⁺ مرتبط با استفاده از فرمول مقابل محاسبه می گردد: E_{mon} -ΣE_{mon} مرتبط با مقدار انرژی به- دست آمده برای ساختار بهینه شده جفت شدگی مورد نظر و E_{mon} مقدار انرژی مونومرها در ساختار بهینه خود میباشند. $\Delta E_{th} \Delta E_{th} \Delta E_{tp}$ $\Delta E_{th} \Delta E_{tp}$ و ΔB بطور مشابه به دست آمده اند. از جفتشدگیهای مورد مطالعه، ۳ مورد از ساختارها پایدار نبودهاند. مشاهده می شود در ساختارهای (1)*U...*X -*D'، (2)*U...*V و(1)*U...*X -*D به واسطه انتقال پروتون در طی فرایند بهینه سازی ساختاری عامل انولی زانتین و اوراسیل به عامل کتونی تبدیل می گردد. از تجزیه و تحلیل مقادیر انرژی در طی فرایند بهینه سازی ساختاری عامل انولی زانتین و اوراسیل به عامل کتونی تبدیل می گردد. از تجزیه و تحلیل مقادیر انرژی در جدول ۱ میتوان نتیجه گرفت که میزان پایداری (2)...X در حضور یونهای ⁺D و ⁽¹⁾ بیش از (1)...X میباشد. همچنین، در حضور ⁺D هر دو ساختار (1) *U...*X و (2)*U....X به ترتیب به واسطه انتقال پروتون به (1)...X و (2)...X تبدیل شدهاند و مقادیر انرژی نشاندهنده پایداری بیشتر جفت شدگی غلط (2)....X میباشد. در حضور ⁽²-اگر چه (1) *U...X به واسطه انتقال پروتون به (1)...X در تعییر یافته ولی (2)*....X میباشد. اگر چه (1) *U...X میباشد. در حضور ⁽¹⁾ میباش دهنده پایداری بیشتر جفت شدگی غلط (2)....X میباشد. در حضور ⁽²⁾ اگر چه (1) *....X تبدیل شدهاند و مقادیر انرژی نشاندهنده پایداری بیشتر جفت شدگی غلط (2)....X میباشد. در حضور ⁽²⁾ اید... آن بیش از (2)X میباش در (2) است.

عهان ۲۹ و ۳۰ آبان ۲۴۰۳





شکل ۱. ساختارهای مورد مطالعه جفتشدگیهای غلط زانتین-اوراسیل

جدول ۱. مقادیر ΔE لم ΔE th ΔEzre، ΔE و ΔC بر حسب (kJ mol⁻¹) در جفتشدگیهای غلط (Cu²⁺ or Cu⁺)-زانتین...اوراسیل

	ΔE	ΔE_{ZPE}	ΔE_{th}	ΔH	ΔG
$Cu^+-XU(1)$	_٧٣/١١	_٧ • / • 0	_70/5.	_٦٧/٧٨	-7 £/V I
$Cu^+-XU(2)$	_٨ • /٣ ٤	$-VA/A \xi$	_V ź / O ź	$-\gamma\gamma/\cdot)$	_٣١/٨٤
$Cu^+-X^*U^*(1)$					
$Cu^{+}-X^{*}U^{*}(2)$					
$Cu^{2+}-XU(1)$	-2・1/21	_19A/WA	_197/01	_190/99	_107/79
$Cu^{2+}-XU(2)$	_225/72	_۲۳۱/9٦	_Y Y 7/AV	_779/50	_1
$Cu^{2+}-X^*U^*(1)$					
$Cu^{2+}-X^*U^*(2)$	_YV•/٣٩	_77\/7	_77./97	_7V7/£ •	_0 5/7 37



۴- نتیجه گیری

در غیاب یونهای Cu^+ و Cu^{2+} در جفتشدگی زانتین با باز اوراسیل کمپلکسی پایدارتر است که زانتین و اوراسیل در فرم های کتو-انولی خود هستند. در جفتشدگیهای غلط زانتین-اوراسیل هنگامی که Cu^+ و Cu^2 از موقعیت Ns، ابه زانتین متصل است سه مورد از ساختارهای اولیه پایدار نبودهاند بطوریکه در ساختار (1)*Cu⁺-X^{*}...U^{*} (2)*Cu⁺-X^{*}...U^{*} و Cu^{2+} و Cu^{2+} (1)*Cu⁺-X^{*}...U^{*} و اسطه انتقال پروتون در طی فرایند بهینهسازی ساختاری عامل انولی زانتین و اوراسیل به عامل کتونی تبدیل می گردد.

منابع و مراجع

[1] Kapri, A., Pant, S., Gupta, N., Nain, S. (**2022**) Recent advances in the biological significance of xanthine and its derivatives: A review. Pharmaceutical Chemistry Journal, 56, 461–474.

[2] Sekine, M., Okamoto, K., Ichida, K. (**2021**) Association of mutations identified in xanthinuria with the function and inhibition mechanism of xanthine oxidoreductase, Biomedicines, 9, 1723-1–1723-16.

[3] Masoodi, H. R., Bagheri, S., Ghaderi, Z. (**2018**). The influence of Cu⁺ binding to hypoxanthine on stabilization of mismatches involving hypoxanthine and DNA bases: a DFT study. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 37, 1923–1934.



لایه انتقال دهنده حفره کار آمد در دیود ساطع کننده نور مبتنی بر نقاط کوانتومی پروسکایت

مصطفى مسلم پور'، حسين آهنگر'، اسماعيل شيبانى^{٣*}.

۱ - کارشناسی ارشد، شیمی آلی، شیمی آلی و پلیمر، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، mostafa.moslempoor@gmail.com ۲- دکتری، شیمی آلی، شیمی آلی و پلیمر، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، hosein.ahan.1371@gmail.com ۳ و *- نویسنده مسئول: استادیار، شیمی آلی، شیمی آلی و پلیمر، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان، e.sheibani@sci.ui.ac.ir

واژگان کلیدی: لایه انتقال دهنده حفره، دیود ساطع کننده نور مبتنی بر نقاط کوانتومی پروسکایت، پایداری، طول عمر.

۱– مقدمه

لایه انتقال دهنده حفره (HTL) نقش حیاتی در عملکرد و کارایی دیودهای ساطع کننده نور مبتنی بر نقاط کوانتومی پروسکایت (Pe-QLEDs) ایفا می کند. در این دستگاهها، HTL مسئول تسهیل حرکت حفرههای مثبت از آند به لایه تابش دهنده نقاط کوانتومی است، جایی که آنها با الکترونها ترکیب می شوند تا نور تولید کنند. HTL اطمینان حاصل می کند که تزریق بار به طور مؤثر انجام می شود، تلفات انرژی را به حداقل می ساند و به تعادل انتقال بار بین حفرهها و الکترونها کمک می کند که برای حداکثر کردن روشنایی و کارایی دستگاه ضروری است. یک ماده ایده آل برای HTL باید تراز انرژی مناسبی با لایههای مجاور، به ویژه لایه تابش دهنده نقاط کوانتومی داشته باشد تا انتقال بار به طور مؤثر انجام شود بدون اینکه موانع انرژی ناخواسته ایجاد کند [۱]. مواد مختلفی برای استفاده به عنوان HTL در Pe-QLED ها مورد بررسی قرار گرفتهاند، از جمله نیمه رساناهای آلی، مولکولهای کوچک و مواد غیرآلی. در میان آنها، ترکیبات بر پایه کاربازول و سایر مواد ارگانیک به دلیل ویژگیهای الکترونیکی مطلوب، قابلیت پردازش در محلول و سازگاری با نقاط کوانتومی پروسکایت محبوب هستند.[۲].

۲- روش

سنتر یک نیمهرسانا آلی با عنوان "N4,N4,N4',N4'-تتراکیس(۴-(۳-فلوئورو-۶-متوکسی-H۹-فلورن-۹-یل)فنیل)-[۱,۱'-بی فنیل]-۴٫۴'-دی آمین (X-1)" طی مراحل متعدد صورت گرفت (شکل ۱). در ادامه، آنالیزهای مرتبط، از جمله طیفسنجی رزونانس مغناطیسی هستهای هیدروژن ((شکل ۲الف) HNMR^۱) و ولتامتری چرخهای (شکل ۲ب) انجام شد.



شکل ۱ : سنتز ترکیب X-1.



شکل ۲: الف) طیف H-NMR ترکیب X-1 در حلال CDCl3. ب) ولتامتری چرخهای ترکیب X-1.

پس از آنالیزهای اولیه، و تعیین غلظت مناسب ترکیب I-X به منظور تحلیل عملکرد الکترولومینسانس، حداکثر درخشندگی (Lmax) سلول شامل این HTM محاسبه شد. همچنین، ولتاژ روشن شدن، که ولتاژ مورد نیاز برای شروع انتشار نور توسط دستگاه است، ۳ ولت مشاهده شد. این پارامترها برای ارزیابی ویژگیهای عملی اساسی Pe-QLED حیاتی هستند. علاوه بر این اندازهگیریها، راندمان جریان (CE) و راندمان کوانتومی خارجی Pe-QLED تعیین شد. بازده کوانتومی خارجی (EQE)، به ویژه، یک معیار مهم برای ارزیابی عملکرد کلی دیودهای ساطع کننده نور مبتنی بر نقاط کوانتومی پروسکایت است، زیرا بازدهای را که الکترونها و حفرهها به فوتونهای ساطع شده تبدیل میشوند، نشان میدهد. در این مورد، Pe-QLED به مقدار ۱۲/۷ درصد EQE دست یافت که نشان دهنده سطح عملکرد امیدوارکنندهای برای دستگاه است (جدول ۱).

HTM	(mg·mL⁻¹)غلظت	$L_{max}(cd \cdot m^{-2})$	$CE_{max}(cd \cdot A^{-1})$	EQE _{max} (/.)
X-1	۱ • / •	$\mathcal{P}/9 \times 1 \cdot $	۴٧/٩	١٢/٧

جدول ۱ : عملکرد الکترولومینسانس ترکیب X-1 در سلول مبتنی بر نقاط کوانتومی.

۳- بحث و نتيجهگيري

استفاده از مواد نیمهرسانای مبتنی بر کاربازول به عنوان مواد انتقال دهنده حفره در Pe-QLEDs به دلیل ویژگیهای مطلوب آنها، از جمله انتقال مؤثر حفره و پایداری، مؤثر واقع شده است. بهطور خاص، Pe-QLED ساخته شده با استفاده از ترکیب CE_{max} عملکرد قابل توجهی را به دست آورد و EQE آن به ۱۲/۷٪ رسید. علاوه بر این، این دستگاه CE_{max} برابر با ۴۷/۹ را نشان داد. این ویژگیها نشان دهنده پتانسیل بالای مواد مبتنی بر کاربازول در بهبود عملکرد دیودهای ساطع کننده نور است. با توجه به پیشرفتهای اخیر در این حوزه، انتظار میرود که تحقیقات بیشتری در زمینه طراحی و بهینه سازی این مواد انجام شود.



منابع و مراجع

[1] Li, X., Haghshenas, M., Wang, L., Huang, J., Sheibani, E., Yuan, S., . . . Xiang, H. **(2023)**. A multifunctional small-molecule hole-transporting material enables perovskite QLEDs with EQE exceeding 20%. ACS Energy Letters, 8(3), 1445-1454.

[2] Zhang, D., Wei, C., Li, X., Guo, S., Luo, X., Jin, X., . . . Xu, B. (2023). Highly Solvent Resistant Small-Molecule Hole-Transporting Materials for Efficient Perovskite Quantum Dot Light-Emitting Diodes. ACS Applied Materials & Interfaces, 15(37), 44043-44053.



بررسی اثرات داروهای سکروپین B و داکومیتینیب بر غشا مدل سلول های سالم ریه انسانی با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی

هانيه معصومي بالسيني' ، دلارا محمد آقايي آ*، محمدعلي دشتي ً.

۱- دانشجو، شیمی فیزیک، شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز، h.masoumi@sutech.ac.ir
 ۲و*-نویسنده مسئول، دانشیار، شیمی فیزیک، شیمی، دانشگده شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز، d_aghaie@sutech.ac.ir
 ۳- دانشجو، شیمی فیزیک، شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز، ma.dashti@sutech.ac.ir

واژگان کلیدی: سرطان ریه سلول غیر کوچک، داکومیتینیب، سکروپین B، شبیه سازی دینامیک مولکولی.

۱–مقدمه

سرطان ریه سلول غیر کوچک (NSCLC) که ۸۵٪ از موارد سرطان ریه را شامل میشود، از عوامل اصلی مرگومیر ناشی از سرطان در جهان است. این نوع سرطان با آسیب به غشای سلولهای پوششی ریه همراه بوده و درمان آن با چالشهای زیادی همراه است. داکومیتینیب، بهعنوان یک مهارکننده تیروزین کیناز از خانواده pan-EGFR، برای درمان SCLC متاستاتیک همراه است. داکومیتینیب، بهعنوان یک مهارکننده تیروزین کیناز از خانواده pan-EGFR، برای درمان NSCLC متاستاتیک شمراه است. داکومیتینیب، بهعنوان یک مهارکننده تیروزین کیناز از خانواده pan-EGFR، برای درمان NSCLC متاستاتیک مهراه است. داکومیتینیب، بهعنوان یک مهارکننده تیروزین کیناز از خانواده بی از ۲۰۲۳، برای درمان NSCLC متاستاتیک تأیید شده و در سلولهای دارای جهش EGFR فعالیت ضد تکثیری قوی دارد (چن،۲۰۲۳). از سوی دیگر، سکروپین B، یک پیتید ضدمیکروبی با بار مثبت است که به طور طبیعی در برخی از موجودات زنده، مانند کرم ابریشم، یافت میشود. این پپتید علاوه بر کشتن باکتریها، دارای قابلیت از بین بردن سلولهای سرطانی نیز می باشد (هوان،۲۰۲۲). در این مطالعه، از رویکرد شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) برای بررسی اثرات دو داروی داکومیتینیب و سکروپین B به طور مجزا بر غشای مدل شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) برای بررسی اثرات دو داروی داکومیتینیب و سکروپین B به طور مجزا بر غشای مدل مربولهای سالم ریه انسان (باهدف درک بهتر مکانیسم عمل این داروها و پیش بینی عوارض جانبی احتمالی آنها) استفاده شده شیه سازی دینامیک مولکولی روشی محاسباتی است که حرکت اتمها و مولکولها را در طی زمان و بر اساس قوانین فیزیکی و نیروهای بینمولکولی، مدل سازی می کند.(سالو–آهن،۲۰۲۲).

۲- روش تحقيق

برای ایجاد ساختار اولیه غشای دولایه از مدلساز آنلاین CHARMM-GUI و برای شبیهسازی دینامیک مولکولی و به تعادل رساندن غشا از نرمافزار NAMD-CUDA استفاده شد. ساختار داروی داکومیتینیب از Navgadro و سکروپین از وب سرور SWISS-MODEL دریافت شد. درعینحال از نرمافزار VMD برای نمایش و تحلیل و از Avogadro به عنوان مدل ساز و بهینه سازی اولیه استفاده شد. در گام اول، غشا به تنهایی مدلسازی شده و به مدت ۲۰۰۱s به تعادل رسید و پارامترهایی مانند بهینه سازی اولیه استفاده شد. در گام اول، غشا به تنهایی مدلسازی شده و به مدت ۲۰۰۱s به تعادل رسید و پارامترهایی مانند نظم غشا، ضخامت دولایه، چگالی جرم و بار، و نسبت سطح به ازاء هر لیپید با افزونه MEMBPLUGIN در کام VMD محاسبه نظم غشا، ضخامت دولایه، چگالی جرم و بار، و نسبت سطح به ازاء هر لیپید با افزونه NEMBPLUGIN در کام محاسبه گردید. در مرحله ی بعد، شبیهسازی غشا یکبار در حضور پپتید ضدمیکروبی و یک بار در حضور داروی داکومیتینیب به مدت ۱۰۰۱۰انجام شد. در انتها، نتایج به دست آمده از شبیه سازی غشا تنها و شبیه سازی های غشا در حضور دارو و پپتید با یکی گردید.



۳-بحث و نتیجه گیری

پارامتر نظم دوتریم (ScD) یکی از معیارهای مهم در بررسی میزان نظم ساختار غشا است (دشتی،۲۰۲۴). نتایج این مطالعه نشان داد که در حضور سکروپین B و داکومیتینیب، ScD لیپیدهای غشا تغییر معناداری نداشته است. (شکل ۱).



شکل ۱ : تغییرات پارامتر نظم دوتریم غشا مدل با سکروپین B و داکومیتینیب در مقایسه با غشا سلول ریه.

ترکیبات مورد بررسی اگرچه با غشا برهم کنش دارند، اما این تعاملات بهاندازه کافی قوی نیستند که تغییر مشخصی در ضخامت دولایه لیپیدی، چگالیهای جرم و بار و سطح به ازاء هر لیپید ایجاد کنند. این مشاهدات نشان دهنده پایداری ساختار غشا مدل سلولهای سالم ریه در حضور هر یک از این دو ترکیب است؛ بنابراین میتوان ادعا کرد که استفاده از این داروها بر غشا سلولهای سالم، فاقد اثر تخریبی بوده و استفاده از آنها از این بابت ایمن است. در (شکل ۲) تصویر دو آنالیز سطح به ازاء هر لیپید و چگالی جرم نیز نشان شده است.



شکل ۲ : تغییرات سطح به ازاء هر لیپید وچگالی جرم غشا مدل با سکروپین B و داکومیتینیب در مقایسه با غشا مدل سلول ریه.



منابع و مراجع

[1] Chen, X., Yu, Y., Zheng, H., Yang, M., Wang, C., Cai, Q., ... & Zhou, Z. (**2023**). Single-cell transcriptome analysis reveals dynamic changes of the preclinical A549 cancer models, and the mechanism of dacomitinib. European Journal of Pharmacology, 960, 176046.

[2] Huan, Y., Kong, Q., Mou, H., & Yi, H. (**2020**). Antimicrobial peptides: classification, design, application and research progress in multiple fields. Frontiers in microbiology, 11, 582779.

[3]Salo-Ahen, O. M., Alanko, I., Bhadane, R., Bonvin, A. M., Honorato, R. V., Hossain, S., ... & Vanmeert, M. (**2020**). Molecular dynamics simulations in drug discovery and pharmaceutical development. Processes, 9(1), 71. [4] Dashti, M. A., Aghaie, D. M., & Bavi, O. (**2024**). Disrupting SARS-CoV-2: Molecular Dynamics Insights into the Role of Human β -Defensin 2 and α -Defensin 5 Peptides in Membrane Structure Alteration. Chemical Physics Impa



بررسى اثرات نوع فاز بر تعامل يونهاى نيكل با نقاط كوانتومى موليبدن سولفيد

لیلا مفتون آزاد' **، مهین انبار کی'، محمود نیاد "

۱ و *- نویسنده مسئول: استادیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی ،دانشکده علوم و فناوری نانو و زیستی و دانشگاه خلیج فارس maftoon@pgu.ac.ir ۲- دانشجو ، شیمی معدنی، گروه شیمی، دانشکده علوم و فناوری نانو و زیستی، دانشگاه خلیج فارس ۳- دانشیار ، شیمی معدنی، گروه شیمی، دانشکده علوم و فناوری نانو و زیستی و دانشگاه خلیج فارس maniad@pgu.ac.ir

واژگان كليدى: موليبدن سولفيد، فلزات سنگين، تئورى تابعى چگالى

۱– مقدمه

تحقیقات در مورد نقاط کوانتومی MoS2 و تعامل آنها با یونهای فلزی، به ویژه از لحاظ جذب و کاتالیز، یک حوزه در حال تحول با کاربردهای امیدوارکننده در محیط زیست و تبدیل انرژی است . MoS2 (دیسلنید مولیبدن) یک دیکالکوژنید فلز انتقالی دو بعدی است که خواص الکترونیکی، نوری و کاتالیستی منحصر به فردی را نشان میدهد .وقتی MoS2 به نقاط کوانتومی کاهش مییابد، این خواص حفظ میشوند و نسبت سطح به حجم بالایی را ارائه میدهد که واکنش پذیری و توانایی جذب آن را افزایش میدهد(تن و همکاران، ۲۰۲۰). تحقیقات نشان دادهاند که نقاط کوانتومی MoS2 میتوانند به طور مؤثری یونهای فلزی مختلفی از جمله نیکل (Ni)، سرب (Pb) و کادمیوم (Cd) را جذب کنند (لیو و همکاران، ۲۰۲۱). این ویژگی، نقاط کوانتومی MoS2 را به کاندیداهای امیدوارکننده برای پالایش محیطی، بهویژه در حذف فلزات سنگین از فاضلاب تبدیل میکند(لو و همکاران، ۲۰۱۹). برای بررسی جذب یونهای نیکل بر روی فازهای شش وجهی H و سه وجهی مولیبدن سولفید T ابا استفاده از محاسبات تئوری تابعی چگالی، در نظر گرفتن ویژگیهای ساختاری و الکترونیکی این فازها ضروری است. فاز شش وجهی یک فاز نیمهرسانا است، در حالی که فاز سه وجهی فلزی اینای جذابی را برای کاربردهای مرتبط با انرژی

این مطالعه به بررسی ویژگیهای جذب نقاط کوانتومی MoS2 برای یونهای فلزی سنگین، با تمرکز بر یونهای نیکل، از طریق محاسبات نظری تابع چگالی (DFT) می پردازد. ما تأثیر ساختارهای فازی مختلف مولیبدن سولفید کوانتومی—به طور خاص، فازهای ۲۱ و ۲۱—را بر روی پتانسیل جذب یونهای نیکل مقایسه کردهایم. یافتههای ما نشان می دهد که انرژیهای جذب منفی وجود دارد که نشان دهده تعاملات خوب پایدار شده بین یونهای نیکل و فازهای نقاط کوانتومی مولیبدن سولفید کوانتومی از جنوبی می فازی مختلف مولیبدن سولفید کوانتومی به طور جذب منفی وجود دارد که نشان دهده تعاملات خوب پایدار شده بین یونهای نیکل و فازهای نقاط کوانتومی مولیبدن سولفید مولیبدن مولفید مان می دهد که انرژیهای جذب منفی وجود دارد که نشان دهده تعاملات خوب پایدار شده بین یونهای نیکل و فازهای نقاط کوانتومی مولیبدن سولفید ماست. محاسبات TTT پیشنهاد می کند که اتمهای گوگرد به عنوان سایتهای اصلی جذب عمل می کنند و نقش کلیدی در جذب یونهای است. محاسبات DFT پیشنهاد می کند که اتمهای گوگرد به عنوان سایتهای اصلی جذب عمل می کنند و نقش کلیدی در جذب یونهای فلزی نیکل دارند. این تحقیق دانش ما را در زمینه مکانیزمهای جذب در نقاط کوانتومی MoS2 و پتانسیلهای جذب یونهای اصلی جذب عمل می کنند و نقش کلیدی در آنها برای کاربردهای عمل می کند که اتمهای گوگرد به عنوان سایتهای اصلی جذب عمل می کنند و نقش کلیدی در آنها برای کاربردهای عملی در پالایش یونهای فلزی سنگین افزایش می دهد.



با استفاده از نرمافزار Gaussian 09 در سطح نظری BHandHLYP/lanl2dz، ویژگیهای ساختاری، هندسی و الکترونیکی هر دو فاز فلزی و نیمهرسانا نقاط کوانتومی MoS2 را با و بدون حضور یونهای نیکل بهینه سازی کردیم. تحلیلها شامل اشکال و انرژیهای اربیتال های مرزی، چگالی حالتهای کل و جزئی و تعاملات ارزیابی شده از طریق اوربیتالهای پیوند طبیعی بود. علاوه بر این، نظریه اتمها در مولکول به منظور ارزیابی واکنش پذیری اتمهای مختلف به کار گرفته شد. محاسبات انحلال با استفاده از مدل عمومی انحلال (-SMD) که بر پایه برهمکنش بین چگالی بار کوانتومی و مولکول حل شونده با یک پیوستار دی الکتریک می باشد انجام گرفت. روش میدان واکنش خود سازگار در چارچوب معادلات انتگرالی مدل پیوستار قطبش پذیر (IEF-PCM)، که در ابزار گوسین ۰۹ به کار گرفته شده است، بررسی شد و حلال مربوطه، آب در نظر گرفته شد. تصحیح خطای انرژی نقطه صفر برای تمامی گونه ها و خطای انطباق مجموعه پایه برای گونه های دوتایی انجام پذیرفت.

دانسکاه اصفیان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

۲- نتایج و بحث

ساختارهای هندسی بهینه شده مربوط به فازهای فلزی و نیمه هادی مولیبدن سولفید در قبل و بعد از حضور یون فلزی نیکل در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ : نقطه کوانتومی مولیبدن سولفید الف-فاز سه وجهی تنها ب) فاز سه وجهی در حضور نیکل ج) فاز شش وجهی تنها د)فاز شش وجهی در حضور نیکل

فاصله نیکل در فاز سه وجهی با نزدیکترین گوگرد ۲.۳۵ آنگستروم و در فاز شش وجهی ۲.۴۵ آنگستروم می باشد. بار ان بی او نیکل در فاز اول ۶.۶۶۲ واحد و در دومی ۲.۷۳۲ واحد می باشد که در فاز سه وجهی انتقال بار بیشتری از نقطه کوانتومی به یون دیده می شود. انرژی جذب فاز اول 1.10ev- و در دومی 1.84ev- می باشد. بررسی های توپولوژی نشان دهنده برهمکنش غیر کووالانسی ضعیف در فاز سه وجهی و کووالانسی ضعیف در فاز شش وجهی بین یون نیکل و گوگرد مرتبط با آن می باشد. سهم این مسأله توسط منحنی چگالی حالات جزئی تأیید می گردد، شکل ۲. همچنین سهم بسیار کم نیکل از هومو در فاز سه وجهی و سهم زیاد این یون در فاز شش وجهی در این نمودار دیده می شود. نمودار هومو و لومو هردو فاز در حضور یون نیکل در شکل ۳ نمایش داده شده است. گاف هومو-لومو در فاز سه وجهی بیشتر و در حضور یون ثابت بود اما در مورد فاز نیمه هادی در حضور نیکل افزایش قابل ملاحظه ای داشت، جدول ۱.

14.7.11.1.91



شکل ۲ : چگالی حالات در حضور نیکل الف- فاز سه وجهی ب)فاز شش وجهی



جدول۱- گاف هومو- لومو

فاز های فلزی و	اختلاف هومو - لومو(ev)
نیمه هادی	
موليبدن سولفيد	
1T-MoS ₂	0.0070
1T-MoS ₂ Ni	0.0070
2H-MoS ₂	0.0067
2H-MoS ₂ Ni	0.0083



شکل ۳-نمودار الف- هومو فاز سه وجهی ب- لومو فاز سه وجهی ج- هومو فاز شش وجهی ج- لومو فاز شش وجهی

۴-نتیجهگیری

در این پژوهش به بررسی جذب یون فلزی نیکل توسط فازهای مولیبدن سولفید پرداختیم.ابتدا دو فاز فلزی و نیمه هادی مولیبدن سولفید از نظر ساختاری بهینه شدند. فازها مجددا در حضور نیکل بهینه شدند و تفاوت های ساختار هندسی، توزیع



بار الکتریکی طبیعی، اوربیتال های پیشرو، اتم در مولکول و چگالی کلی و جزئی حالت ها بررسی شد. همچنین با کمک توابع ترمودینامیکی جذب فازهای مولیبدن سولفید برای رقابت در جذب یون فلزی نیکل مورد مقایسه قرار گرفته شد. مطالعه نیز در سطح نظری BHandHLYP/lanl2dz در حضور حلال آب انجام گرفت.دیده شد که فاز نیمه هادی برهمکنش های قوی تری با یون نیکل نشان می دهد که انرژی جذب، اتم در مولکول، حضور هومو روی نیکل، تأثیر گرفتن گاف هومو- لومو از حضور نیکل و سهم بالای چگالی حالات نیکل در کمپلکس تشکیل شده با این فاز در هومو مؤید این مطلب می باشند.

منابع و مراجع

[1] Moosavi, M., & Memar, Z. O. (**2020**). Extension of transferable coarse-grained models to dicationic ionic liquids. Physical Chemistry Chemical Physics, 22(42), 24431-24445. Tan, C.; Cao, X.; Wu, X.J.; He, Q.; Yiang, J.; Zhang, X.; Chen, J.; Zhao, W.; Han, S.; Nam, G.H.; et al. Recent advances in ultrathin two-dimensional nanomaterials. Chem. Rev. 2017, 117, 6225.

[^Y] Liu, Y.; Ma, C.; Zhang, X.; Ngo, H.N.; Guo, W.; Zhang, M.; Zhang, D. Role of structural characteristics of MoS2 nanosheets on Pb2+ removal in aqueous solution. Environ. Technol. Innov. 2021, 22, 101385.

[3] Luo, J.; Fu, K.; Sun, M.; Yin, K.; Wang, D.; Liu, X.; Crittenden, J.C. Phase-mediated heavy metal adsorption from aqueous solutions using two-dimensional layered MoS2. ACS applied materials & interfaces. 2019, 11(42), 38789.

[4] Nie, C.; Yin, M.; Zhao, Y.; Zhao, C.; Zhang, B.; Song, X.; Yi, X.; Zhang, Y.; Luo, L.; Wang, S. Tailoring the fluorescent and electronic properties of 2H-MoS2 by step-by-step functionalization. J. Phys. Chem. C 2021, 125, 25739.





مرضيه حقيقى ، مريم مقدس * ،سجاد صداقت ".

1: دانشجوی کارشناسی ارشد، شیمی دارویی ، گروه شیمی دارویی ،دانشگاه آزاداسلامی واحد شهریار، marzieah.h1379@gmail.com ۲و*- استادیار ، شیمی آلی، گروه علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد صفادشت ،moghaddas2015@gmail.com ۳- استاد ، شیمی کاربردی، گروه شیمی ، دانشکده علوم پایه دانشگاه آزاداسلامی واحد شهرقدس، S.sedaghat@qodsiau.ac.ir

واژگان كليدى: رهايش كنترل شده، مزوحفره سيليكايى، 6-KIT و بتامتازون دى سديم فسفات

۱– مقدمه

سیستمی که قادر به آزادسازی یک عامل بایواکتیو حمل شده در یک مکان خاص با یک سرعت خاص باشد،سیستم رهایش دارو به حساب می آید. سیستم های نوین دارورسانی مجموعه روش هایی هستند که جهت ایجاد تغییرات زمانی یا مکانی در روند آزادسازی دارو در بدن، آگاهانه توسط سازنده فرمولاسیون دارویی به کار گرفته می شوند. در سیستم های دارورسانی با رهایش کنترل شده، سرعت آزادسازی دارو از شکل دارویی، به طرق مختلف تحت کنترل درآمده و بر اساس ومواد حامل، عدم رهایش نابهنگام مولکول های دارو و رهایش کنترل شده مولکول های دارو با سرعت مناسب تا رسیدن به یک غلظت موضعی موثر از خواص یک سیستم دارورسانی مطلوب است(بیوندی،۲۰۰۸).

۲- روش

۲-۱- تهیه مزوحفره سیلیکایی و پیوند زنی ۳-آمینو پروپیل اتوکسی سیلان به سطح آن

جهت سنتز سیلیکای مزوحفره سه بعدی (KIT-6) از روش ریو و همکارانش استفاده شد(کیم،۲۰۰۳وکلیتز۲۰۰۵). برای تهیه نانوسیلیکای هگزاگونال آمین دارشده ابتدا تحت جو نیتروژن ۱۱ میلی مول آمینوپروپیل تری اتوکسی سیلان به مخلوط دوغابی ۳گرم سیلیکای KIT-6 مکعبی سه بعدی و ۱۰۰ میلی لیتر تولوئن تحت جو نیتروژن اضافه شد. سپس به مدت ۴۸ ساعت در دمای ۱۱۰ درجه سانتی گراد تحت شرایط بازروانی قرار گرفت. بعد از اتمام زمان واکنش رسوب سفیدرنگ حاصل به ترتیب با ۱۰۰ میلی لیتر تولوئن و ۱۰۰ میلی لیتر دی کلرومتان و ۱۰۰ میلی لیتر هگزان شستشو داده شد. پودر سفید رنگ

۲_۲_ تهیه سیلیکای مزوحفره حاوی دارو

مقدار ۱۰۰ میلی گرم دارو درون بالن حجمی ریخته و سپس ۵ میلی لیتر آب مقطر به آن افزوده می شود. سپس ۵۰میلی گرم سیلیکای مزوحفره به آن افزوده شده و محلول حاصل به مدت ۲۴ ساعت روی همزن مغناطیسی هم زده می شود. رسوب، بااستفاده از سانتریفیوژ از محلول جداشده و دو مرتبه با آب مقطر توسط سانتریفیوژ شستشو شده و در نهایت رسوب در دمای ۶۰ درجه سانتیگراد خشک شد.

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳

۲_۳_ رهایش دارو

بررسی رهایش دارو از سیلیکا به روش برون تنی در محیط بافری پتاسیم کلرید اسیدکلریدریک(pH=1.2)، سدیم استات ـ اسیداستیک (pH=4.8) و PH=7.2-7.4) و در دمای ۳۷-۳۵ درجه سانتیگراد انجام شد. در این روش در فواصل زمانی مشخص از محلول بافری نمونه برداری شده و تغییرات غلظت دارو در طول موج ۲۴۲ نانومتر با دستگاه طیف سنجی UV-Vis بررسی گردید.

۳- بحث و نتایج

به منظور تعیین ویژگی های ساختاری سیلیکای مزوحفره از روش دستگاهی میکروسکوپ الکترونی روبشی(SEM) استفاده شد. شکل ۱. تصویر بیانگر ریخت شناسی شبه صخره ای با ذرات به هم چسبیده دارای اندازه ۴۰۰–۱۰۰ نانومتر است. در بیشتر موارد، ذرات سنتز شده دارای نظم و اندازه مخره ای با ذرات به هم چسبیده دارای اندازه ۴۰۰–۱۰۰ نانومتر است. در بیشتر موارد، ذرات سنتز شده دارای نظم و اندازه معینی نیستند(بولائود،۲۰۱۲). جهت تایید افزایش عامل آمینی به 6-KIT از تکنیک FTIR استفاده شد. در مقایسه طیف های معینی نیستند(بولائود،۲۰۱۲). جهت تایید افزایش عامل آمینی به 6-KIT از تکنیک FTIR استفاده شد. در مقایسه طیف های معینی نیستند(بولائود،۲۰۱۲). جهت تایید افزایش عامل آمینی به 6-KIT از تکنیک FTIR استفاده شد. در مقایسه طیف های FTIR در 6-NH2 اولیه و FTIR-6-NH2، افزایش گروه آمینی مشاهده شد.همچنین مقایسه طیف های FTIR سیلیکا قبل و بعد از بارگذاری دارو وجود دارو در ساختار سیلیکای مزوحفره را نشان داد. تجزیه و تحلیل UV-Vis برای بررسی رهایش بتا را براگذاری دارو در مای از سیلیکای مزوحفره را نشان داد. تجزیه و تحلیل UV-Vis برای بررسی رهایش بتا را برگذاری دارو در ساختار سیلیکای مزوحفره را نشان داد. تجزیه و تحلیل UV-Vis برای بررسی رهایش بتا مای آمیزون دی سدیم فسفات گروه عاملی آمینی به 1.20 و و 4.80 و دارو در ساختار سیلیکای مزوحفره را نشان داد. تو د و دایل قال و دایش داد می و دارو در مازی سیلیکای مزوحفره را نشان داد. توای و و دارو مایی آمیزوپروپیل رهایش داد و دارو در مایش داد و در مازی شده بدن و بافرهای 1.20 و 4.80 صورت گرفت. گروه عاملی آمینوپروپیل رهایش دارو را به دلیل قطبیت تحت تاثیر قرار می دهد.



شکل ۱ : تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی ساختار KIT-6

۴- نتیجهگیری

نتایج نشان داد که BSP روی سیلیکای مزوحفره عامل دار نشده قرار نگرفت اما روی سیلیکای میان حفره آمین دار شده بارگذاری به میزان مناسبی انجام شد. همچنین مشاهده شد که بارگذاری تنها در محیط اسیدی و برروی سیلیکای عامل دار شده اتفاق می افتد. با بررسی فرآیند رهایش دارو در محیط های بافری رهایش دارو در بافر 4.8 پس از ۴۸ ساعت به مقدار ماکزیمم می رسد که مربوط به نفوذ بافر و خروج حلال از ماتریس در محیط رهایش است.

منابع و مراجع

[1] Biondi, M., Ungaro, F., Quaglia, F., & Netti, P.A. (2008). Controlled drug delivery in tissue engineering. Adv Drug Deliver Rev, 60(2), 229-242.

[2] Kim, T. W., Kleitz, F., Paul, B., & Ryoo, R. (2005). MCM-48-like large mesoporous silicas with tailored pore structure: facile synthesis domain in a ternary triblock copolymer– butanol– water system. Journal of the American Chemical Society, 127(20), 7601-7610.

[3] Kleitz, F., Choi, S. H., & Ryoo, R. (2003). Cubic Ia3d large mesoporous silica: synthesis and replication to platinum nanowires, carbon nanorods and carbon nanotubes. Chemical Communications, (17), 2136-2137.

[6] Boulaoued, A., Fechete, I., Donnio, B., Bernard, M., Turek, P., & Garin, F. (2012). Mo/KIT-6, Fe/KIT-6 and Mo–Fe/KIT-6 as new types of heterogeneous catalysts for the conversion of MCP. Microporous and mesoporous materials, 155, 131-142.



سینتیک تخریب فوتوکاتالیزوری پارا دی متیل آمینو-پارا آزوبنزن سولفونیک اسید در محیط بافری با استفاده از تیتانیم دی اکسید نانو ساختار

مرتضی منتظر ظهوری* او شیوا جوهری ۲

mmzohory@yahoo.com استاد، شیمی معدنی، گروه شیمی،دانشکده علوم و دانشگاه یاسوج ۲ استادیار ، شیمی فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی- واحد یاسوج

واژگان كليدى: پارا دى متيل آمينو-پارا آزوبنزن سولفونيک اسيد، سينتيک تخريب، فوتوکاتاليزور، تيتانيم اکسيد

۱– مقدمه

پیشرفتهای صنعتی از یک سو باعث پیشرفت کشورها و از سوی دیگر باعث تخریب محیط زیست شده است. آلایندههای مختلف شیمیایی حاصل از وسایل نقلیه، کارخانجات صنعتی و سموم مورد استفاده در بخش کشاورزی صدمات جبران ناپذیری به محیط زیست وارد کرده و باعث آلودگی آب، خاک و هوا شده است. در سالهای اخیر با توجه به ماهیت غیر سمی، غیر قابل جل، ارزان بودن و فعالیت فتوکاتالیزوری بالای برخی از نانوذرات همانند 2nO، TiO و غیره استفاده از این ترکیبات در تخریب حلی ارزان بودن و فعالیت فتوکاتالیزوری بالای برخی از نانوذرات همانند 2nO، TiO و غیره استفاده از این ترکیبات در تخریب حلی ارزان بودن و فعالیت فتوکاتالیزوری بالای برخی از نانوذرات همانند 2nO، TiO و غیره استفاده از این ترکیبات در تخریب حل، ارزان بودن و فعالیت فتوکاتالیزوری بالای برخی از نانوذرات همانند 2nO، TiO و غیره استفاده از این ترکیبات در تخریب فتوکاتالیزوری و حذف آلایندههای رنگی بسیار مورد توجه بوده است. رنگهای آزو از جمله مهمترین رنگهای آلاینده محیط زیست بوده و مورد توجه محققین حوزه این مطالعه بوده است. ایرا دی متیل آمینو-پارا آزوبنزن سولفونیک اسید یکی از این نوع آلایندها می باشد که در این پژوهش به بررسی سینتیک تخریب آن در حضور تیتانیوم دی اکسید نانوساختار پرداخته می این نوع آلایندها می باشد که در این پژوهش به بررسی سینتیک تخریب آن در حضور تیتانیوم دی اکسید نانوساختار پرداخته می شود.

۲- روش کار

پس از بهینه کردن مقدار و نوع فوتوکاتالیزور، ۲۰ میلی لیتر محلول ۳۰ میلی گرم بر لیتر پارا دی متیل آمینو-پارا آزوبنزن سولفونیک اسید تهیه شده در pH برابر۵، ۷ و ۹ همراه ۲۰ میلی گرم فوتوکاتالیزور نانوتیتانیم دی اکسید (آناتاز) به عنوان مقدار بهینه در داخل یک سل فوتوشیمیایی ریخته شد و به آن یک مگنت اضافه گردید. سپس به مدت ۵ دقیقه گاز اکسیژن در آن دمیده و درب آن بسته شد و به مدت ۹۰ دقیقه در مقابل نور ماوراء بنفش به هم زده شد. پس از این زمان، فوتوکاتالیزور به وسیله دستگاه سانتریفوژ جدا شد و مقدار باقی مانده پارا دی متیل آمینو-پارا آزوبنزن سولفونیک اسید با استفاده از روش اسپکترومتری اندازه گیری شد. این اندازه گیری ها در زمان مختلف دیگر نیز انجام گرفت.



۳- بحث و نتيجه گيري

با توجه به داده های تجربی حاصل از بخش تجربی، نمودارهای جذب باقیمانده –زمان، سینتیکی و مدل سینتیکی لانگموئیر-هینشل وود مطابق آنچه در شکل های ۱–۳ آورده شده اند، ترسیم گردیدند. بر اساس روابط موجود در مدل سینتیکی لانگمییر-هینشل وود ثابت های سرعت تخریب کلی(kobs) و سرعت تخریب در سطح (kr) به همراه ثابت های تعادل جذب-واجذب(KA) رنگ پارا دی متیل آمینو-پارا آزوبنزن سولفونیک اسید در سطح فوتوکاتالیزور با استفاده از شیب و عرض از مبدا نمودارهای شکل های ۲ و ۳ ارزیابی گردیده و نتایج در جدول ۱ آورده شده اند.



شکل۱- نمودارهای جذب -زمان رنگ در pH های بافری ۵، ۷ و۹



شکل۲- نمودارهای سینتیکی رنگ در pH های بافری ۵، ۷ و ۹



شکل۳- نمودار 1/R بر حسب 1/C در pH های بافری ۵، ۷ و ۹

جدول۱-داده های سینتیکی-ترمودینامیکی فرایند تخریب فوتوکاتالیزوری								
EO	pH=5	pH=7	pH=9					
K _A	4.92×10^{-2}	2.6×10^{-1}	6.4 × 10 ⁻²					
k _{obs}	8.74×10^{-2}	3.91 × 10 ⁻²	4.49×10^{-1}					
kr	1.54	4.31	10.75					

نتایج به دست آمده نشان می دهد که با افزایش pH سرعت واکنش هم به طور کلی و هم در سطح فوتوکاتالیزور افزایش می یابد که می تواند حاکی از جذب بیشتر رنگ در سطح کاتالیزور و همچنین نفوذ موثر کونه های اکسنده در محلول است.

منابع و مراجع

[1] Bianco Prevot, A., Fabbri, D., Pramauro, E., Baiocchi, C., Medana, C., High-performance liquid chromatography coupled to ultraviolet diode array detection and electrospray ionization mass spectrometry for the analysis of intermediates produced in the initial steps of the photocatalytic degradation of sulfonated azo dyes, Journal of Chromatography A Volume 1202, Issue 2, 22 August 2008, Pages 145-154

[2] Montazerozohori, M., Karami, B. and Habibi, M. H. (2006) Photodegradation kinetics of some thiols and thiones in aqueous suspension of zinc oxide. Ann. Chim., 96(5-6), 285-292.

[3] Montazerozohori, M., Habibi, M. H., Joohari S. and Khodadostan, V. (2007) The effects of some operational parameters in photodegradation of benzylamine and aniline and their kinetics in aqueous suspension of TiO2 and Pt -loaded TiO2. Ann. Chim., 97(10) 1015-1026.



تخریب نوری ۳و۷-دی آمینوفنوتیازین-۵-ایوم کلرید در حضور فوتوکاتالیزور روی اکسید نانو ساختار در محیط بافری: یک مطالعه سینتیکی

مرتضی منتظر ظهوری او شیوا جوهری*۲

۱ – استاد، شیمی معدنی، گروه شیمی،دانشکده علوم و دانشگاه یاسوج ۲ +ستادیار ، شیمی فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی- واحد یاسوج shjoohari@yahoo.com

واژگان کلیدی: ۳و۷-دی آمینوفنوتیازین-۵-ایوم کلرید ، سینتیک تخریب، فوتوکاتالیزور، روی اکسید نانو ساختار

۱– مقدمه

تحقیقات زیادی برای به دست آوردن و توسعه روشهای پیشرفته بیوشیمی، تجزیهای، روشهای وابسته به خواص شیمیایی و فیزیکی مواد، جهت مشخص کردن و حذف مواد آلوده کننده از آب صورت گرفته است. انواع روشهای بیولوژیکی، فیزیکی و شیمیایی از قبیل رسوبگیری شیمیایی، جداسازی آلوده کنندهها، لخته کردن، لخته کردن الکتریکی، حذف بوسیله جذب بر روی کربن فعال، کلریناسیون و ازوناسیون، اسمز معکوس،تبادل یونی و انواع روشهای اکسیداسیون برای تصفیه ی فاضلابهای صنعتی ورنگزدایی بکار برده می شوند. در چند دهه-ی اخیر فرآیندهای اکسیداسیون پیشرفته بعنوان جانشین روشهای قبلی مطرح شدند و بهبود چشمگیری را در تخریب آلایندههای آلی ایجاد کردهاند. در چند دهه اخیر فرآیندهای فوتوکاتالیزوری برمبنای نیمهرساناهای ساده یا ترکیبی از جمله روش های ارزنده با حداقل نقایص روش های فوق نقش ویژه ای را در حذف آلاینده ها زیست محیطی به ویژه رنگهای آلی به خود اختصاص داده اند[1–7].

۲- روش کار

پس از بهینه کردن مقدار فوتوکاتالیزور روی اکسید نانو ساختار، ۲۰ میلی لیتر محلول حاوی ۱۵ میلی گرم بر لیتر ۳و۷-دی آمینوفنوتیازین-۵-ایوم کلرید تهیه شده در pH های برابر۲، ۵، ۷ و ۹ همراه ۲۰، ۲۵ و ۱۵ میلی گرم فوتوکاتالیزور به عنوان مقدار بهینه در هر pH بافری در داخل یک راکتور فوتوشیمیایی حاوی همزن ریخته شد.. هوادهی به طور مداوم در طول واکنش صورت گرفت. پس از زمان های مشخص، فوتوکاتالیزور به وسیله دستگاه سانتریفوژ جداسازی شده و مقدار باقی مانده ۳و۷-دی آمینوفنوتیازین-۵-ایوم کلرید با استفاده از روش اسپکتروفوتو متری اندازه گیری گردید.

۳- بحث و نتیجه گیری

به کمک داده های تجربی حاصل از بخش تجربی، نمودارهای جذب باقیمانده –زمان، نمودار سینتیکی و مدل سینتیکی لانگموئیر-هینشل وود مطابق آنچه در شکل های ۱-۳ آورده شده اند، ترسیم گردیدند. بر اساس روابط موجود در مدل سینتیکی میں فنریک ایران دانتگاه اصفهان ۲۹و ۳۰ آبان ۱۴۰۳ دانتگاه اصفهان ۲۹و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

لانگمییر-هینشل وود ثابت های سرعت تخریب کلی(kobs) و سرعت تخریب در سطح (kr) به همراه ثابت های تعادل جذب-واجذب(KA) رنگ ۳و۷-دی آمینوفنوتیازین-۵-ایوم کلرید در سطح فوتوکاتالیزور روی اکسید با استفاده از شیب و عرض از مبدا نمودارهای شکل های ۲ و ۳ ارزیابی گردیده و نتایج در جدول ۱ خلاصه شده اند.







شکل۲- نمودار سینتیکی رنگ در pH های بافری۲،۵، ۷ و ۹



شکل۳- نمودار 1/R بر حسب pH در pH های بافری۲، ۵، ۷ و۹



-دى آمينوفنوتيازين-۵-ايوم كلريد	ریب فوتوکاتالیزوری ۳و۷	رموديناميكي فرايند تخ	جدول۱-داده های سینتیکی-ت
---------------------------------	------------------------	-----------------------	--------------------------

Buffer media	Kinetic parameters		
pH=2	K _A (L. mg-1)	5.62×10 ⁻³	
	k _r (mg.min ⁻¹ .L ⁻¹)	1.31	
	k _{obs} (min⁻¹)	1.46×10 ⁻²	
pH=7	K _A (L. mg-1)	9.01×10 ⁻³	
	k _r (mg.min⁻¹.L⁻¹)	0.84	
	k _{obs} (min⁻¹)	3.61×10 ⁻²	
pH=9	K _A (L. mg-1)	2.43×10 ⁻²	
	k _r (mg.min ⁻¹ .L ⁻¹)	1.10	
	k _{obs} (min⁻¹)	6.21×10 ⁻²	
pH=11	K _A (L. mg-1)	6.16×10 ⁻⁴	
	k _r (mg.min ⁻¹ .L ⁻¹)	149.25	
	k _{obs} (min⁻¹)	7.97×10 ⁻²	

نتایج به دست آمده نشان می دهد که با افزایش pH ثابت سرعت واکنش کلی افزایش می یابد. همچنین ثابت سرعت تخریب در سطح با افزایش pH ابتدا کاهش و سپس در محیط بازی مجددا افزایشی می شود.

منابع و مراجع

[1] Yu, D., Cai, R. & Liu, Z. (2004). Studies on the photodegradation of Rhodamine dyes on nanometer-sized zinc oxide, Spectrochem. Acta A, 60, 1617–1624.

[2] Akyol, A. & Bayramoglu, M. (2005). Photocatalytic degradation of Remazol Red F3B using ZnO catalyst, J. Hazard. Mater. B, 124, 241–246.

[3] Montazerozohori, M., Habibi, M. H., Joohari S. and Khodadostan, V. (2007) The effects of some operational parameters in photodegradation of benzylamine and aniline and their kinetics in aqueous suspension of TiO2 and Pt -loaded TiO2. Ann. Chim., 97(10) 1015-1026.



مطالعه تئوری روش NICS با محاسبات کوانتومی برای ترکیب سیکلوبوتادین وترکیبات آن با استخلاف های مختلف

اكبرمنصوري نسب

استادیار، شیمی فیزیک، شیمی ،دانشگاه ملی مهارت (mansourinasab1350@gmail.com)

واژگان کلیدی: سیکوبوتادین ، جابه جایی شیمیایی مستقل هسته، روش های کوانتومی ، تئوری تابعی چگالی

۱– مقدمه

مفهوم آروماتیسیته کاربرد زیادی در شیمی دارد و با توسعه ترکیبات آروماتیک، کاربرد قاعده هوکل برای الکترون های πغیرمستقر،که آروماتیسیته را با مسطح بودن ترکیبات مرتبط می سازد، محدود کرد و باعث شد که تعریف جدیدی برای آن در نظر گرفته شود .امروزه آرماتیسیته، مناسب ترین گزینه برای بیان خواص مغناطیسی ترکیبات می باشد . درسال ۱۹۹۶، شاخص NICS (کمیت جابه جایی شیمیایی مستقل از هسته)توسط شیلر و همکارانش برای تعیین آرماتیسیته و ضد آرماتیسیته انواع ترکیبات حلقوی و خوشه ای معرفی شد و در حال حاضر به دلیل فهم ساده و کارایی مناسب در انواع نرم افزارهای محاسباتی به سادگی قابل انجام است .مقدار NICS به عنوان منفی مطلق پوشیدگی الکترونی محاسبه شده در مرکز حلقه یا نقاط دیگرتعریف می شود و حلقه های یا مقادیر NICS منفی را آروماتیک و با مقادیرمثبت را ضدآروماتیک در نظرمی گیرند، که برحسب ppm بیان می شود .[1,2] دراین پژوهش با استفاده از روش و محاسبات کوانتومی در مجموعه پایه های آغازین (HF) برحسب ppm بیان می شود .[2,1] دراین پژوهش با استفاده از روش و محاسبات کوانتومی در مجموعه پایه های آغازین (HF) و تابعی چگالی (B3LYP)) در سری های مختلف، انرژی ZPE که موسوم به انرژی نقطه صفرمی باشد، برای بررسی پایداری استفاده شده است ودر ادامه شاخص NICS برای تعیین خصلت آروماتیسیته استفاده شده است. برای این کار مولکول سیکلو و تابعی چگالی (HS)) در سری های مختلف، انرژی ZPE که موسوم به انرژی نقطه صفرمی باشد، برای این کار مولکول سیکلو استفاده شده است ودر ادامه شاخص NICS برای تعیین خصلت آروماتیسیته استفاده شده است. برای این کار مولکول سیکلو

۲- روش کار

دراین کار، محاسبه ها برای بهینه سازی ساختارسیکلوبوتادین درچارچوب نظریه تابع آغازین و نظریه تابعی چگالی با نرم افزارگوسین۰۳ [3]ودرمحیط گازی انجام شد. این محاسبات با به کارگیری توابع هیبریدیB3LYP،HF با مجموعه پایه ها **216-6، **6-316-6، **G1++15 انجام شد. در جدول ۱ انرژِیZEP ترکیب سیکلوبوتادین با روش های کوانتومی به دست آمده است . میں فنریک ایران معنی کا جنگ کی جنگ ہے۔ دانتگاہ اصفہان ۲۹و-۱۳ آبان ۱۴۰۳ کی جنگ کی جنگ

جدول ۱ : انرژی ZPE ترکیب سیکلوبوتادین با روش های کوانتومی

روش	ZPE(HF)
HF/3-21G**	-152.729
HF/6-31G**	-153.582
B3LYP/6-31G**	-154.621
B3LYP/6-311++G**	-154.660

همچنین با قراردادن یک اتم مجازی به عنوانBQ در فاصله معین بر حسب آنگستروم در مولکول سیکلوبوتادین ، NICS به دست آمده است و بر اساس رابطه زیر خصلت آرماتیسیته آن بررسی شد .

BQ Isotropic=-NICS

(1)

همه روش های کوانتومی با پایه های مختلف نشان می دهد که مولکول سیکلوبوتادین ، یک ترکیب ضدآروماتیک است و در ادامه کار با قرار دادن استخلاف های مختلف روی مولکول(شکل ۱)، مقدار NICS محاسبه شده است که نشان می دهد مقدار آن همواره مثبت است. اگرچه با قرار دادن استخلاف هاشاخص آروماتیسیته رو به کاهش است .(جدول ۲)

۱و۲	های	موقعيت	وتادین در	سيكلو	استخلاف دار	ل های ا	، مولكوا	NICS برای	۲ :مقدار	جدول
-----	-----	--------	-----------	-------	-------------	---------	----------	-----------	----------	------

روش	مولکول ۱	مولكول٢	مولكول٣	مولكول۴	مولكول۵
HF/3-21G**	+23.754	+21.1063	+22.7723	+30.465	+19.321
HF/6-31G**	+21.651	+18.3700	+21.0506	+28.389	+18.432
B3LYP/6-31G**	+21.599	+17.7386	+18.3309	+26.928	+18.532
B3LYP/6-311++G**	+22.406	+17.1593	+18.997	+27.442	+18.322



شکل ۱: مولکول سیکلو بوتادین و ساختار مولکول های استخلاف دار آن

۳.نتیجه گیری

همه روش های کوانتومی با پایه های مختلف نشان می دهد که مولکول سیکلو بوتادین، یک مولکول ضدآروماتیسیته است که با استخلاف دار کردن آن ، می توان مقدار NICS کاهش داد. به بیان دیگر نوع استخلاف و موقعیت آن ، می تواند روی مقدار NICS اثر داشته باشد .



مراجع

۱ . عادل رئیسی وانایی، فاطمه حاجی زاده،"بررسی خصلت آروماتیکی برخی نانوساختارهای کربنی پلی سیکلی کاسه ای شکل " مجله علمی- پژوهشی شیمی کاربردی ، سال دوازدهم، شماره ۴۱(۱۳۹۶)،ص۱۰۹

۲.هادی بهزادی،زهراخلیل نیا، بررسی ویژگی آروماتیسیته نانوبلورهای Si₂₄H₁₂ و Si₂₆H₁₂ درچارچوب نظریه تابعی چگالی" نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران "دوره ۳۸ شماره ۱ (۱۳۹۸)،ص۲۹

3.M.A.,CheesemanJ.R.,ZakrzewskiV.G.,MontgomeryJ.A.,StratmanR.E.,BurantJ.C.,Dapprichs.,MillamJ.M.,DanielsA.D.,Kudink.N.Strain.M.C.,Farkaso.,TomasiJ.,BaroneV.,cossiM.CammiR.,Mennuccic.,Pomelli C.Adamoc.,Clifford S.,Ochterski E.S.,pople J.A.,Gaussiano3(2003)M.Cammi



بررسی ضرایب عبور و بازگشت و اثرات اتلافی در پراکندگی کوانتومی ناهرمیتی

سارا موحدمنش'*، على مقارى ً

۱-نویسنده مسئول: دانشجو،شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی دانشگاه تهران saramovahedmanesh@ut.ac.ir ۲-استاد ، شیمی،شیمی فیزیک دانشکده شیمی دانشگاه تهران،maghari@ut.ac.ir

واژگان كليدى: پراكندگى كوانتومى، پتانسيل ناهرميتى، پتانسيل غير موضعى، معادله ليپمن-شويينگر

۱– مقدمه

در کتابهای مرسوم مکانیک کوانتومی آمده است که هامیلتونی باید هرمیتی باشد، اما امروزه عدم هرمیتی بودن هامیلتونی در زمینههای مختلف فیزیک توجه بسیاری را به خود جلب کرده است. این مفهوم برای توجیه پدیدههایی در فیزیک کوانتومی، مانند فروپاشی هستهای (nuclear decay) که در آن ذرات ساطع شده هرگز به هسته باز نمی گردند و انرژی خود را از دست میدهند، به کار گرفته می شود. از این رو، مکانیک کوانتومی غیرهرمیتی به عنوان پلی برای مطالعه سیستمهای کوانتومی باز مطرح شده است، که به واقعیت فیزیکی این سیستمها نزدیکتر است.

۲- روش

در سال ۱۹۹۶ نلسون و هاتانو، مدلی را برای هامیلتونی غیرهرمیتی ارائه کردند که بصورت زیر است و $\hat{V}(x)$ یک پتانسیل دلخواه و $ilde{g}$ یک بردار ثابت حقیقی است:

 $\widehat{H} = \frac{(\overrightarrow{p} + i\overrightarrow{g})}{2m} + \widehat{V}(x) \tag{1}$

ما با استفاده از این مدل ما برای سیستم مورد نظر خود هامیلتونی ای به شکل زیر ارائه کردیم:

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}}{2m} + ig\widehat{p} + \widehat{V}(x) \tag{(7)}$$

و بجای V(x) از پتانسیل جدایی پذیر غیرموضعی رنک ۱ استفاده می کنیم تا با استفاده از آن معادله لیپمن-شویینگر را بصورت تحلیلی حل کرده و ضرایب عبور و بازگشت را برای سیستم مورد مطالعه بررسی کنیم.

$$\hat{V}(x) = |\chi\rangle \nu_0 \langle \chi| \tag{7}$$

در سیستم مورد مطالعه، مانند شکل زیر، ذرات از سمت چپ وارد یک چاه پتانسیل میشوند؛ برخی از سد چاه عبور کرده و برخی دیگر بازتاب میشوند (ضریب بازتاب R). از میان ذراتی که به ناحیه پتانسیل رسیدهاند، برخی نیز میتوانند از آن خارج شوند (ضریب عبور T) و معادله لیپمن-شویینگرحالت پراکندگی برای سیستم مورد نظر بصورت زیر است:

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} |\psi\rangle \tag{(f)}$$

که در آن $\hat{F}_{0} = rac{\hat{p}}{2m} + ig\hat{p}$ به عنوان هامیلتونی در غیاب پتانسیل غیرموضعی و E به عنوان مقادیر ویژه \hat{H}_{0} و \hat{Y} پتانسیل غیرموضعی است. با حل این معادله در فضای تکانه و سیس تبدیل فوریه آن، و همچنین کاهش دادن متغییر های آن و جایرموضعی است. با حل این معادله در فضای تکانه و سیس تبدیل فوریه آن، و همچنین کاهش دادن متغییر های آن و جایگذار آن ها با پارامتر های کاهش یافته ی بی بعد، تابع موج را در فضای مکان به شکل زیر حاصل می شود:

ت و جهار مین کنفرانس سمی فنریک ایران

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آیان ۱۴۰۳

$$\begin{split} \psi_{scattering} &= \psi(x) = Ae^{-x} + F \frac{e^{-\beta x/2}}{C^2 + D^2} \left[-C \sin \frac{\Delta x}{2} + D \cos \frac{\Delta x}{2} \right] \end{split} \tag{(a)}$$
 $, \quad \beta = 2mg \quad D = \beta \Delta^2 \quad , \quad C = \beta^2 \Delta - 2\Delta (1 + q^2) \quad F = \frac{8\langle \chi | \varphi \rangle}{(1 - Q)} \quad , \quad A = -\frac{\pi\langle \chi | \varphi \rangle}{(1 - Q)(\beta - q^2 - 1)} \quad (\Delta)$ $Q = \langle \chi | \frac{1}{E - \hat{H}_0} | \chi \rangle$ $= \sqrt{-\beta^2 + 4q} \quad g = \sqrt{2mE}$ $d = \sqrt{-\beta^2 + 4q} \quad g = \sqrt{2mE}$

 $Q = \frac{2(3+2\beta+q^2)}{(1+\beta+q^2)^2}$ (۶) با در نظر گرفتن شرط پیوستگی تابع موج در سه ناحیه 1 و2 و3 ، همچنین تعریف:

 $\psi_1 = e^{ikx} + Re^{-ikx}$. $\psi_2 = \psi_{scattering}$. $\psi_3 = T e^{ikx}$ (۷) و با اعمال شرط پیوستگی در نقطه $\chi = -\lambda$ و درنتیجه آن تساوی $\psi_1 = \psi_{scattering}$ بر*ای ضریب بازگشت* (R) د*اریم*

$$R = \psi_{scattering} - 1 \tag{(A)}$$

به همین ترتیب با اعمال شرط پیوستگی در $\lambda=\chi$ و مساوی قرار داردن ψ_{3} و $\psi_{scattering}$ و χ برای ضریب عبور au داریم:

 $T = \psi_{scattering}$





۳- نتیجه گیری

 $(1 \cdot)$

و بی بعد بصورت زیر است:

اگر اندازه ناحیه پتانسیل به بینهایت میل کند، ضریب بازگشت نیز به بینهایت میل خواهد کرد و اگر این مقدار به صفر نزدیک شود، به کمترین مقدار ضریب بازگشت خواهیم رسید. ضریب عبور رفتاری کاملاً مخالف ضریب بازگشت دارد؛ بهطوری که با افزایش اندازه ناحیه پتانسیل، این ضریب به صفر میل می کند و در کمترین مقدار ناحیه پتانسیل، بیشترین مقدار خود را داراست. در سیستم مورد مطالعه، مجموع ضرایب عبور و بازگشت کمتر از یک است که نشاندهنده اتلاف انرژی در سیستم است. وجود یک جمله غیرهرمیتی در هامیلتونی سیستم، که به صورت معرفی شد، توانست نقش اتلاف انرژی در سیستم را توضیح دهد و سیستم را یک گام به سیستمهای واقعی فیزیکی نزدیکتر سازد.



منابع و مراجع

[1] Hatano, N., and Obuse, H. Delocalization of a non-Hermitian quantum walk on random media in one dimension. *Annals of Physics*.

[2] Maghari, A., & Tahmasbi, N. Scattering properties for a solvable model with a three-dimensional separable potential of rank 2. *Journal of Physics*


سنتز و مطالعه رفتار الکتروشیمیایی NMC811 به عنوان ماده فعال کاتدی در باتریهای لیتیوم-یون

میرقاسم حسینی'*، فردین موسوی'.

۱ و *- میر قاسم حسینی: استاد، شیمی فیزیک، الکتروشیمی، شیمی، مرکز تحقیقاتی الکتروشیمی سیستم های تولید و ذخیره سازهای انرژی و تبریز، (mg-hosseini@tabrizu.ac.ir) ۲- فردین موسوی، دانشجو، شیمی فیزیک، الکتروشیمی، شیمی، ، مرکز تحقیقاتی الکتروشیمی سیستم های تولید و ذخیره سازهای انرژی و دانشگاه تبریز، (fardinmousavi75@gmail.com)

واژگان كليدى: باترى ليتيوم-يون، مواد فعال كاتدى NMC811، مواد فعال آندى، شارژ و دشارژ.

۱– مقدمه

انواع مختلفی از باتریهای لیتیومی وجود دارد که از رایجترین آنها میتوان به باتریهای لیتیوم-یون اشاره کرد زیرا در مقایسه با سایر باتریهای قابل شارژ بالاترین چگالی انرژی را دارد. همچنین بدلیل سبک وزن بودن، ولتاژ کاری بالا، پتانسیل شارژ سریع و دشارژ خود به خود پایین، چرخه عمر طولانی و ایمن بودن توجه زیادی را در مقایسه با سایر باتریها به خود جلب کرده است [۱]. باتریهای لیتیوم-یون با استفاده از تبادل الکترونها از طریق واکنشهای اکسیداسیون و احیا جریان مستقیم تولید میکنند. ساختار کاتد و آند به صورت لایه لایه است که یونهای لیتیوم بین این لایهها قرار میگیرند و منجر به شارژ و دشارژ باتریهای لیتیوم-یون میشوند. در زمان شارژ، در الکترود مثبت لیتیوم بین این لایهها قرار میگیرند و منجر به شارژ و دشارژ باتریهای لیتیوم-یون میشوند. در زمان شارژ، در الکترود مثبت لیتیوم به یون لیتیوم مثبت تبدیل میشود و یونهای سمت آند به طرف کاتد حرکت میکنند و در زمان دشارژ، یونهای لیتیوم به یون لیتیوم مثبت تبدیل میشود و یونهای میشوند. مواد کاتد به سمت آند حرکت میکنند و در زمان دشارژ، یونهای لیتیوم به یون لیتیوم مثبت تبدیل میشود و از میشوند. مواد کاتد به همای لیتیوم-یون باید دارای یونی مثل یک فلز واسطه باشند تا هم به آسانی واکنش اکسایش/کاهش میشوند. مواد کاتدی باتریهای لیتیوم-یون باید دارای یونی مثل یک فلز واسطه باشند تا هم به آسانی واکنش اکسایش/کاهش در آن رخ دهد و هم هادی الکترونی خوبی در انتقال الکترون باشند. همچنین واکنش ماده انتخابی با لیتیوم سریع و بر گشت پذیر باشد و از لحاظ زیست محیطی هیچ گونه آلایندگی ایجاد نکند. ازسایر ویژگیهای مواد کاتدی باتریهای لیتیومی میتوان به ظرفیت و ولتاژ بالا در واکنش با لیتیوم، عدم تغییر ساختار ماده بر اثر واکنش با لیتیوم و ارزان قیمت بودن اشاره کرد. در این مقاله کاتد لیتیوم نیکل منگنز کبالت دیاکسید مورد مطالعه قرار گرفته است.

۲-روش

هم رسوبی یکی از انواع روش های سنتز از فاز محلول میباشد [7]. نمکهای سولفات فلزات واسطه نیکل، منگنز وکبالت به نسبت ۱۸۰۸ (Ni:Mn:Co) درون بشر حاوی ۱۵۰۳ آب مقطر ریخته تا حل شوند. پس از حل شدن کامل نمکها چند قطره آمونیوم هیدروکسید به منظور تثبیت PH در ۱۱ اضافه شد. محلول به مدت ۱۲ ساعت همزده شد تا یک سوسپانسیون به رنگ آبی حاصل شود. مخلوط بدست آمده ۲۴ ساعت در دمای محیط بصورت ساکن نگهداری گردید تا ماده ژل مانند ایجاد شود. آبی حاصل شود. مخلوط بدست آمده ۲۴ ساعت در دمای محیط بصورت ساکن نگهداری گردید تا ماده ژل مانند ایجاد شود. آبی حاصل شود. مخلوط به مدت ۱۲ ساعت همزده شد تا یک سوسپانسیون به رنگ آبی حاصل شود. مخلوط بدست آمده ۲۴ ساعت در دمای محیط بصورت ساکن نگهداری گردید تا ماده ژل مانند ایجاد شود. سپس به وسیله کاغذ صافی از آب جدا و رسوبات قهوهای رنگ حاصل روی کاغذ صافی، برای خشک شدن به آون با دمای ۱۲۰ در جه سانتی گراد منتقل شد. بعد از آنکه حلال بصورت کامل تبخیر شد، پودر قهوهای رنگ NMC حاصل شد. در ادامه پودر درجه سانتی گراد منتقل شد. بعد از آنکه حلال بصورت کامل تبخیر شد، پودر قهوهای رنگ

حاصل شده با لیتیوم کربنات بهعنوان منبع لیتیوم ترکیب و جهت آماده سازی الکترود کاتد در برابر گرافیت تجاری با الکترولیت Li(Nio.8Mno.1Coo.1)O2 استفاده از میکروسکوپ الکترونی LiPF6 استفاده شد. به منظور بررسی مورفولوژی سطح الکترود Li(Nio.8Mno.1Coo.1)O2 با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (EDAX) مورد بررسی قرار گرفت. همچنین از نقاط مختلف ماده تست شناسایی طیفسنجی آنالیز عنصری (EDAX) روبشی (SEM) مورد بررسی قرار گرفت. همچنین از نقاط مختلف ماده تست شناسایی طیفسنجی آنالیز عنصری (EDAX) گرفته شد. نتایج حاصل درستی سنتز را تایید میکنند. جهت ارزیابی رفتار سینتیکی سل، از تست امپدانس الکتروشیمیایی مقادیر مقاومت بالک و مقاومت انتقال بار برای این الکترود به ترتیب برابر با ۱۸/۸ و ۳۹۰ اهم بدست آمد. پیکهای موجود در ولتاژهای ۴/۳ و ۲۰۸ ولت واکنشهای ردوکس را در تست ولتامتری چرخه ای نشان میدهد. همچنین مطابق شکل ۱ براساس مقادیر سال می ۳/۴ و ۲۰۸ ولت واکنشهای ردوکس را در تست ولتامتری چرخه اول به ترتیب برابر و ۱۶۰ اهم در برایر ۱۹۹۵ و ۱۶۸۸ ای ۲۰۰۸ و ۲۰۰ ایم در این الکترود و دارژ برای چرخه اول به ترتیب برابر این المی ای ۲۰۰۸ و ۱۶۸ مابق مین منابع میکند. می کندر و دشارژ برای چرخه اول به ترتیب برابر آمد. در تیک و معابق شکل ۱ براساس عملکرد سل بسته شده در جریان ۲۰۰۸ و ۱۶۸۸ و ۱۸/۸ و ۱۹۰۰ هم بدست آمد. بیکهای موجود در می کرد سل بسته شده در جریان ۲۰۰۸ و ۱۶۸۸ و ۱۶۰۰ همچنین مطابق شکل ۱ براساس می می دولت برابر ای ۱۹۵۸ و ۱۹۰۸ هم بدست آمد.



شکل ۱: منحنی شارژ /دشارژ چرخه اول برای سل کامل NMC811/graphite

۴–نتیجهگیری

در این کار پژوهشی کاتد لیتیوم نیکل منگنز کبالت اکسید ۸۱۱ را با خلوص بالا سنتز و رفتار شیمیایی آن را در سل بسته شده در برابر گرافیت تجاری بررسی کردیم. تکنیکهای شناسایی درستی سنتز را اثبات نمودند. همچنین پایداری چرخهای منحنی CV، تست امپدانس الکتروشیمیایی و شارژ/دشارژ مشخص میکند که ماده سنتز شده بهعنوان الکترود کاتدی عملکرد خوبی دارد.

منابع و مراجع

[1] Blomgren, G. E. (2016). The development and future of lithium ion batteries. Journal of The Electrochemical Society, 164(1), A5019.

[2] Liang, L., Du, K., Peng, Z., Cao, Y., Duan, J., Jiang, J., & Hu, G. (2014). Co-precipitation synthesis of Ni0. 6Co0. 2Mn0. 2 (OH) 2 precursor and characterization of LiNi0. 6Co0. 2Mn0. 2O2 cathode material for secondary lithium batteries. Electrochimica Acta, 130, 82-89.



معرفی ترکیبات جدید برای مهار رشد سلولهای سرطان پستان توسط محاسبات 3D-QSAR

مهلا مهر پرور '*، علی ابراهیمی'

۱ - دانشجو، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، Mahla.mehrparvar@gmail.com ۲- استاد، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، ebrahimi@chem.usb.ac.ir

واژگان كليدى: سرطان پستان، CoMSIA، CoMFA، 3D-QSAR، طراحى دارو، بتا كربولاين.

۱– مقدمه

سرطان پستان شایع ترین و دومین علت مرگ ناشی از سرطان در بانوان است. داروهای ضد سرطان قوی و متعددی در دسترس هستند که از تکثیر سلول و DNA جلوگیری می کنند [۱،۲]. گیرندههای سطحی اهداف درمانی امیدوار کنندهای برای تولید دارو در برابر سرطان پستان میباشند [۳]. سلولهای MDA-MB-231 در پروتئین STAT3، مناسب ترین گیرنده برای درمان سرطان پستان هستند. محاسبات JD-QSAR از طریق مدلهای CoMFA در پروتئین دولکولی مقایسهای) و CoMSIA (شاخصهای شباهت مولکولی مقایسهای) رویکرد مناسبی جهت شناسایی و پیشنهاد ساختارهای دارویی ارائه دادهاند. این مطالعات همبستگی خوبی بین فعالیتهای تجربی و پیش بینی شده با قابلیت تخمینی عالی و قابل اعتمادی نشان میدهند. علاوه بر این با توجه به بررسیهای انجام شده مهار کنندههای بتا کربولاین گزینههای درمانی مناسبی برای رده سلولی -MDA-MB-231 231 مشتقات بتاکربولاین با استفاده از مدل سازی کیوسار ساختارهای تجربی و مصنوعی

۲- روش

در مجموع تعداد ۵۶ ساختار از مشتقات بتا کربولاین با مقادیر فعالیت تجربی آنها بر رده سلولی MDA-MB-231 انتخاب مجموعه-و بهینه شده است. کلیه محاسبات BD-QSAR اعم از تراز کردن مولکولها، تبدیل مقادیر IC50 به IC50، انتخاب مجموعه-های آموزشی و آزمایشی، ایجاد مدلهای COMFA و CoMSIA، بررسی نقشههای کانتوری برای شناسایی استخلافهای کارآمد، تشکیل و بهینهسازی کتابخانهای از ترکیبات و تخمین فعالیتهای مهارکنندگی ترکیبات کتابخانه توسط نرم افزار کارآمد، تشکیل و بهینهسازی کتابخانهای از ترکیبات و تخمین فعالیتهای مهارکنندگی ترکیبات کتابخانه توسط نرم افزار یروی تریپوز صورت گرفته است. ایجاد مدلها و بهینهسازی کلیه ترکیبات کتابخانه با بار گاستیگر هوکل و میدان نیروی تریپوز صورت گرفته است. دقت مدلهای کیوسار سهبعدی بر اساس مقادیر ۰۰۵۰ - Q^2 ، ۰۰۶۰ - R^2 و ۰۰۶۰۰ R²test (ممچنین بزرگتر از ²R) بررسی شده و اعتبارسنجی و تایید مدل با استفاده از رابطه (۱) میباشد. RESS، مجموع مجذور اختلاف فعالیت تخمینی از تجربی و SSD، مجموع مجذور اختلاف میانگین مجموعه آموزشی از مقدار تجربی است. R²test = 1 - $\frac{PRESS}{SSD}$

۳- بحث



شکل ۱: ساختار بتاکربولاین با نمایش موقعیتهای استخلاف شده و معرفی استخلافهای تأثیرگذار.

۳- نتیجه گیری

با توجه به نتایج، ترکیبات بتاکربولاین با استخلافهای نشان داده شده در شکل ۱ برای موقعیتهای R1 و R2، فعالیت بسیار مناسبی بر مهار و رشد سلولهای سرطان پستان خواهند داشت. با استفاده از محاسبات کیوسار سهبعدی میتوان با صرف کمترین وقت و هزینه، ترکیباتی موثر برای درمان سرطان پستان و سایر بیماریها شناسایی و به مرحله سنتز دارو رساند. پس از معرفی ترکیبات دارویی توسط کیوسار سهبعدی میتوان با انجام محاسبات شبیهسازی داکینگ مولکولی، دینامیک مولکولی، ADME (جذب، توزیع، متابولیسم و دفع) و کوانتوم مولکولی، ساختار را با قاطعیت بیشتری برای تولید دارو شناساند. درواقع این محاسبات مسیر تشخیص تا تولید دارو را کوتاهتر میکنند.

منابع

 Ismail, M. A., Abusaif, M. S., El-Gaby, M. S., Ammar, Y. A., & Ragab, A. (2023). A new class of antiproliferative activity and apoptotic inducer with molecular docking studies for a novel of 1, 3-dithiolo [4, 5-b] quinoxaline derivatives hybrid with a sulfonamide moiety. RSC advances, 13(18), 12589-12608.
 Byun, W. S., Kim, W. K., Yoon, J. S., Jarhad, D. B., Jeong, L. S., & Lee, S. K. (2020). Antiproliferative and antimigration activities of fluoro-neplanocin a via inhibition of histone H3 methylation in triple-negative breast cancer. Biomolecules, 10(4), 530.



[3] Marra, A., Trapani, D., Viale, G., Criscitiello, C., & Curigliano, G. (**2020**). Practical classification of triplenegative breast cancer: intratumoral heterogeneity, mechanisms of drug resistance, and novel therapies. NPJ breast cancer, 6(1), 54.

[4] Byun, W. S., Lim, H., Hong, J., Bae, E. S., Lee, S. B., Kim, Y., ... & Hong, S. (**2023**). Design, synthesis, and biological activity of marinacarboline analogues as STAT3 pathway inhibitors for docetaxel-resistant triple-negative breast cancer. Journal of Medicinal Chemistry, 66(4), 3106-3133.

[5] Abdullahi, M., Uzairu, A., Eltayb, W. A., Shallangwa, G. A., Mamza, P. A., & Ibrahim, M. T. (2023). 3D-QSAR, homology modelling of influenza hemagglutinin receptor (StrainA/WS/1933), molecular dynamics, DFT, and ADMET studies for newly designed inhibitors. Journal of the Indian Chemical Society, 100(4), 100975.
[6] Tripos International. (2012). Sybyl-X 2.1. St. Louis, MO: Tripos International, 2012.



بررسی محاسباتی جذب فسژن در نانوخوشه های B40 و Ca@B40

پروین نریمانی'، زینب بیگلری'*

narimani.pa@fs.lu.ac.ir - دانشجوی دکتری ، شیمی فیزیک ، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه لرستان، harimani.pa ۲ دانشیار ، شیمی فیزیک ، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه لرستان، biglari.z@lu.ac.ir

واژگان كليدى: فولرن B40 ، محاسبات DFT ، فسژن

۱–مقدمه

فسژن (COCl) گازی بسیار سمی و بیرنگ است که کاربردهای صنعتی زیادی از جمله در تولید ایزوسیاناتها، آفت کش ها، داروها، پلاستیکهای مهندسی، مواد پلییورتان و ... دارد.فسژن به وفور در فرآیندهای صنعتی تولید میشود و تهدیدی بالقوه برای سلامت عمومی به ویژه در مناطق شهری است. مقدار ppm / ۰ فسژن میتواند به طور جدی روی ریهها، چشمها و پوست تأثیر بگذارد و استنشاق طولانی مدت باعث ادم ریوی و حتی مرگ می شود [۱]. بنابراین یافتن سنسورهای بسیار حساس، کمهزینه، قابل حمل و بادوام برای تشخیص فسژن ضروری است. اخیراً تحقیقهای نظری بر روی خواص فولرن B40 به دلیل ویژگی هایی مانند وزن سبک، پایداری بالا و رسانایی به عنوان جاذب برای جداسازی و ذخیره CO2 انجام شده است [۲]. هدف اصلی این تحقیق سنجش توانایی B40 و B40 برای جذب فسژن به عنوان یک حسگر شیمیایی می باشد.

۲- روش انجام محاسبات

در این پژوهش همهی ساختارها با استفاده از محاسبات کوانتومی DFT در سطح محاسباتی (B3LYP/6-31G(d بهینه شدند. به منظور اطمینان از عدم وجود فرکانس موهومی، محاسبات فرکانس در همین سطح محاسباتی با استفاده از برنامه محاسباتی گوسین ۰۹ انجام شد. رسم ساختارهای بهینه شده با استفاده از نرم افزار گوس ویو نسخه ۰۶ انجام شده است.

۳– بحث

به منظور بررسی جذب مولکول فسژن بر روی فولرن B40 ، فسژن از زوایای مختلف و در موقعیت های متفاوتی روبروی فولرن B40 قرار گرفت که پس از بهینه سازی و بررسی مقادیر انرژی و اوربیتالهای HOMO و LUMO سه موقعیت قابل تشخیص شناسایی شد. در شکل ۱ ، ساختارهای بهینه شده ی این کمپلکسها نشان داده شده است. مقادیر جذب پایین (حدود 0.1eV-) در جدول ۱، نشان می دهد که COCl2 به طور موثر توسط B40 جذب نمی شود. ما سعی کردیم برای بهبود مقادیر جذب اتم کلسیم را در قفس B40 کپسوله کنیم. با توجه به جدول ۱ ، مشاهده می شود کپسوله سازی اتم Ca درون فولرن B40 ، سبب افزایش انرژی جذب تا حدود IeV- می شود.



شکل ۱: ساختار هندسی بهینه شده فولرن

جدول ۱: انرژی اوربیتال های HOMO (ε_H) ، (ε_L) ، انرژی گپ (HLG) ، درصد تغییرات AHLG) (ε_H) ، و مقادیرانرژی جذب (E_{ads}) کمیلکس های یایدار (eV).

Structure	ε _H	$\epsilon_{\rm L}$	HLG	%ΔHLG	Eads
B40	-6.11	-3.24	2.86	-	-
S1	-6.08	-3.22	2.86	0.1	-0.01
S2	-6.14	-3.28	2.86	0.05	-0.01
S3	-6.06	-3.20	2.86	0.06	-0.01
Ca@B40	-4.60	-3.19	1.41		
Ca@S1	-4.60	-3.19	1.41	50.73	-1.08
Ca@S2	-4.27	-3.31	0.96	66.42	-1.08
Ca@S3	-4.53	-3.13	1.40	50.94	-1.09

نتيجه گيرى

جذب فسژن بر روی فولرن B40 با کمک محاسبات DFT بررسی شد. مقادیر محاسبه شده حاکی از جذب ضعیف فسژن بر روی این فولرن است ، اما با قرار دادن اتم کلسیم در قفس B40 ، انرژی جذب به طرز محسوسی افزایش می یابد. بنابراین می توان فولرن B40 کپسوله شده با اتم کلسیم را ، به عنوان جاذب موثری برای جذب فسژن معرفی کرد.

منابع

- Bähr, A., J. Diedenhoven, and H. Tüysüz, *Cl2 adsorption and desorption over ordered mesoporous carbon materials as an indicator for catalytic phosgene formation*. Chemie Ingenieur Technik, 2020. 92(10): p. 1508-1513.
- 2. Gao, G., et al., *Modelling CO2 adsorption and separation on experimentally-realized B40 fullerene*. Computational Materials Science, 2015. **108**: p. 38-41.



اثرات برهم کنشی ویژه و غیر ویژه حلال روی پاسخ غیرخطی نوری مرتبه سوم (ضریب شکست و ضریب جذب) متیل یلو

زینب نصرالله زاده.محمدصادق ذاکر حمیدی.سید مسعود سید احمدیان

دکتری تخصصی، شیمی فیزیک، علوم پایه، پردیس فاطمه الزهرا(تبریز) / دانشگاه فرهنگیان Z.Nasrollahzadeh@cfu.ac.ir محمد صادق ذاکر حمیدی، دکتری تخصصی، شیمی فیزیک،پلاسما،دانشگاه تبریز zakerhamidi@tabrizu.ac.ir سید مسعود سید احمدیان، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان seyedahmadian@azaruniv.ac.ir

واژگان کلیدی: برهم کنش های ویژه و غیر ویژه حلال، ضریب شکست غیر خطی، ضریب جذب غیرخطی، Z-scan،

۱– مقدمه

زمینه اپتیک غیرخطی در دهههای اندکی به عنوان زمینه امیدبخشی با کاربردهای مهم در زمینه فوتوالکتریک و فتونیک پیشرفت کرده است.. پارامتر مهم در مطالعات اپتیک غیرخطی جهت تعیین کارایی محیط به منظور کاربری صنعتی ضریب شکست مرتبه سوم و ضریب جذب میباشد(یوآنگ و همکاران ۲۰۰۸). روشهای مختلفی به منظور تعیین این پارامترها وجود دارد که بهترین آنها روش جاروب Z میباشد. این روش یک تکنیک تک پرتو خیلی حساس و ساده برای اندازه گیری ضریب شکست و ضریب جذب غیرخطی میباشد(ون استایرلند و شیخ بهایی ۱۹۹۸)

۲- مواد و روش ها

ابزارهای جاروب z روزنه بسته استاندارد برای اندازه گیری ضریب شکست و در حالت روزنه باز برای اندازه گیری ضریب جذب غیرخطی استفاده میشود. عبور نمونه از روزنه در میدان دور به صورت تابعی از موقعیت، Z نمونه غیرخطی در اطراف موقعیت کانون اپتیک خطی ثبت میشود (شیخ بهایی و ون استایرلند ۱۹۸۹). در این آزمایشات محلول هایی از رنگینه متیل موقعیت کانون اپتیک خطی ثبت میشود (شیخ بهایی و ون استایرلند ۱۹۸۹). در این آزمایشات محلول هایی از رنگینه متیل موقعیت کانون اپتیک خطی ثبت میشود (شیخ بهایی و ون استایرلند ۱۹۸۹). در این آزمایشات محلول هایی از رنگینه متیل یلو در حلال های متفاوت تهیه و طیف خطی و عبور آنها با روش جاروب Z ثبت و نمودارهای مربوطه رسم گردید و مقادیر ضریب شکست و جذب خیرخطی حلال موجود در جداول میزان تریب شکست و جذب خطی و غیرخطی محاسبه گردیدند. در نهایت با استفاده از پارامترهای حلال موجود در جداول میزان تریب شکست و جذب خطی بر سی گردید.

۳- اندازه گیری ضریب شکست غیر خطی

اختلاف بین عبور قله و دره را در جاروب z به صورت $\Delta T_{pv} = T_p - \Delta T$ تعریف می کنیم که T_p و T_p و T_v به ترتیب عبور نرمالیزه قله و دره می الفائی $\Delta \phi_o$ و ΔT_{pv} برای شکست غیر خطی مرتبه سوم در غیاب NLA عبارتست از:

$$\Delta T_{pv} = \cdot / \mathfrak{f} \cdot \mathfrak{F} (1 - S)^{\cdot / \mathfrak{r} \vee} | \Delta \phi_o$$

$$\Delta \phi_o = \frac{\tau \pi}{\lambda} n_{\tau} I_o L_{eff}$$

۴- اندازه گیری ضریب جذب غیر خطی

(1)

البته هنگامی که روزنه ای نداشته باشیم میتوان ضریب جذب غیرخطی را از چنین آزمایشی که به آزمایش روزنه باز مرسوم است، استخراج کرد.. مقادیر ضریب جذب خطی و ضریب جذب و ضریب شکست غیر خطی مرتبه سوم برای رنگینه متیل یلو در جدول شماره (۱) آمده است.

 $\Delta T = \frac{-q_0}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\left[1 + \frac{Z^2}{Z_0^2}\right]} \qquad |q_0| \ll 1 \qquad q_0 = \beta I_0 L_{eff}$ (7)

طی مرتبه سوم برای رنگینه متیل یلو	سریب جذب و ضریب شکست غیر -	جدول(۱): مقادیر ضریب جذب خطی و ذ
-----------------------------------	----------------------------	----------------------------------

solvent	α (cm ⁻¹)	$n_2 \times 10^{-7} (cm^2/W)$	$\beta \times 10^{-4} (cm/W)$
1-Butanol	2. 02	-0. 20	0.41
Methanol	2. 81	-0. 23	0.36
1,4-Dioxane	1. 82	-0. 15	0.27
DMF	2.78	-0. 22	1.00
Chloroform	2. 23	-0. 20	0.95
1,2-Ethandiol	3.04	-0. 27	0.58

۵- بحث و نتیجه گیری

همچنین به منظور بررسی اثرات حلالی داده های مربوط به آنالیز چند پارامتری با رابطه کاملت_تافت برای این رنگینه در جدول شماره ۲ آمده است. جدول مربوط به آنالیز چند پارامتری نشان میدهد که در مورد جذب غیر خطی مقادیر توانایی گیرندگی پیوند هیدروژنی و در مورد n2 ،مقادیر قطبش پذیری بیشترین سهم را دارد(ذاکر حمیدی و همکاران ۲۰۱۵)

	α_0	а	b	S	R
$\alpha(\text{cm}^{-1})$	۰/٩٧(±٠/٤١)	۰/٤٠(±٠/٢٧)	-•/Y•(±•/٤٩)	۲/۱٤(±۰/۵۷)	۰/۹۰
	β₀	а	b	S	R
β (cm/w)×10 ⁻⁴	۱/۱۹(±•/٧٠)	۰/۲۱(±۰/٦٨)	-1/٤٨(±•/٩٣)	-•/09±(1/V•)	•/٧0
	n _{2,0}	а	b	S	R
n 2(cm2/w)×10 ⁻⁷	-•/ ` •(±•/• `)	-•/•٦(±•/•٢)	•/•٣(±•/•٣)	-•/\°(±•/•٣)	•/9£

جدول (۲): دادههای مربوط به آنالیز چند پارامتری با رابطه کاملت- تافت در رنگینه متیل یلو.





بررسی رفتار توزیع کافئین در سیستمهای دوفازی آبی پلیپروپیلن گلیکول- نمک تتراآلکیل آمونیوم هالید

نهال نصرت پور^۱، نوسیبه ابراهیمی^{۲*}، رحمت صادقی^{۳*}.

۱ - دانشجوی کارشناسی ارشد شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، nahalnpr632@gmail.com ۲- نویسنده مسئول: استادیار شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، rsadeghi@uok.ac.ir ۳- نویسنده مسئول: استاد شیمیفیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، rsadeghi@uok.ac.ir

واژگان کلیدی: سیستم دوفازی آبی، نمکزدایی، آلکالوئید، ضریب توزیع

۱– مقدمه

امروزه دسترسی محدود به آبهای شیرین و هزینههای بالای دستیابی به آب آشامیدنی نگرانیهای زیادی در خصوص استفاده از منابع آب به وجود آورده است. از اینرو، قوانین زیستمحیطی در بسیاری کشورها سختگیرانهتر شده و نیاز به پژوهشهای بنیادی با هدف توسعه روشهای کارامد برای بازیابی و استخراج ترکیبات گوناگون جهت جلوگیری یا به حداقل رساندن تخليه زبالههاي صنعتي به محيطزيست بيشتر شده است [1]. از طرفي، بازيافت و استخراج محصولات زيستي از منابع طبيعي كه پردازش پاييندستي نام دارد، مورد توجه قرار گرفته است. ضايعات توليد شده از مواد غذايي به نوبه خود حاوي ترکیبات ارزشمندی از جمله رنگدانهها و طعمدهندههای طبیعی هستند که بازیابی آنها برای مصارف غذایی و کاربردهای دیگر حائز اهمیت است [۲]. یکی از محدودیتهای اصلی در جداسازی ترکیبات هدف (زیستی و غیرزیستی) از مخلوطهای پیچیدهایی که در آن قرار دارند، حد تشخیص بالای دستگاههای تجزیهای مرسوم است. از این رو، پیش تغلیظ ترکیبات هدف در نمونههای استخراجی، پیش نیاز طراحی یک فرایند جداسازی رضایت بخش است. در سالهای اخیر، سیستمهای دوفازی آبی (ATPS) در پیش تغلیظ مواد مختلف از جمله پروتئینها، آنتی بیوتیکها، ویروسها، داروها، یونهای فلزی، رنگها و زیستمولکولهای متنوع مورد استفاده قرار گرفتهاند. از جمله مزایای استفاده از ATPSها در طراحی فرآیندهای استخراج میتوان به سازگاری با محیط زیست (به دلیل ماهیت آبی دو فاز در حال تعادل)، شرایط عملیاتی ملایم، تنظیم پذیری خواص (با تغییر اجزای سازندهی فازها)، انتقال جرم سریع و زمان کوتاه جداسازی اشاره نمود. پژوهشهای صورت گرفته منجر به تولید ATPSهای متنوعی شده است که از جمله میتوان به ATPSهای پلیمر-پلیمر، پلیمر-نمک، مایع یونی-نمک ، الکل-نمک، پلیمر-کربوهیدرات، پلیمر-آمينواسيد، و پليمر-مايع يوني اشاره كرد. در اين ميان، ATPSهاي پليمر-پليمر و پليمر-نمك، بيش از پنج دهه براي بررسي کاربردهای ATPS مورد مطالعه قرار گرفتهاند [۳].



۲-مواد و روش کار

۲-۱- مواد مورد استفاده

نمکهای تترا متیل آمونیوم برماید (TMAB) و تترا اتیل آمونیوم برماید (TEAB)، پلیمر پلیپروپیلنگلیکول (PPG) و آلکالوئید کافئین (آنالیت استخراجی) از شرکت مرک آلمان خریداری شد. آب دو بار تقطیر نیز در تهیه نمونهها استفاده شد.

۲-۲- روش تعیین خطوط اتصال

مخلوطی با غلظت مشخص نمک و پلیمر از ناحیه دوفازی نمودار فاز مایع-مایع با استفاده از ترازوی مدل CP225D ساخت آشرکت Sartorius آلمان تهیه شد. به روش مرچاک غلظت تعادلی اجزا در دو فاز هر ATPS تعیین شد.

۲-۳-روش تعیین ضریب توزیع

analytik پس از افزدون کافئین به مخلوطهای دوفازی با استفاده از دستگاه اسپکتروفتومتر UV-VIS ساخت شرکت genalytik ز jena کشور آلمان فازها آنالیز شدند.

۳-نتایج و بحث

شکل (۱) خط اتصال بهدست آمده برای یک مخلوط دوفازی انتخابی از سیستم سهتایی آبی PPG-TMAB را نشان میدهد. ضریب توزیع کافئین (K) که در این کار به صورت نسبت غلظت کافئین در فاز غنی از پلیمر به غلظت کافئین درفاز غنی از نمک تعریف شد، بزرگتر از واحد بهدست آمد؛ یعنی این آلکالوئید تمایل دارد در فاز آبگریزتر غنی از پلیمر تغلیظ شود. شکل (۲) لگاریتم ضریب توزیع کافئین در ATPS های مورد بررسی را نشان میدهد.



شکل ۱: خط اتصال مربوط به یک مخلوط دوفازی انتخابی از سیستم سه تایی آب + TMAB + PPG400.





بررسی پایداری ساختاری و دینامیکی آلیاژ هویسلر معکوس Li2BAg : براساس تئوری تابع چگالی

پریا نصیرزاده^{۱*}، ابراهیم نعمتی کنده^۲ ۲- دانشجو، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه ارومیه ۶- دانشیار ، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه ارومیه، رایانامه: e.nemati@urmia.ac.ir

واژگان كليدى: تقريب GGA، انرژى تبادلى-ھمبستگى، دستگاه ترموالكتريك، اسپينترونيك،

۱– مقدمه

در این پژوهش، ساختار معکوس آلیاژ هویسلر Li2BAg مورد مطالعه قرار گرفته است. این دسته از ترکیبات در سال ۱۹۰۳ توسط فردریش هویسلر برای نخستین بار کشف شدند و از آن پس توجه بسیار زیادی را به خود جلب کردند. ترکیباتی که تا به اکنون مورد مطالعه قرار گرفتند، در ۴ گروه دستهبندی شدهاند: ۱) آلیاژ هویسلر کامل X2YZ ۲) آلیاژهای نیمه هویسلر به فرم اکنون مورد مطالعه قرار گرفتند، در ۴ گروه دستهبندی شدهاند: ۱) آلیاژ هویسلر کامل X2YZ 7) آلیاژهای نیمه هویسلر به فرم XYZ ۳) آلیاژهای نیمه هویسلر به فرم ۲۷۷۲ ۳) آلیاژهای هویسلر معکوس که در این دسته یکی از اتمهای X مشمول تغییر موقعیت نسبت به موقعیت خود در ساختار کامل آلیاژ میشود، ۴) آلیاژهای هویسلر معکوس که در این دسته یکی از اتمهای X مشمول تغییر موقعیت نسبت به موقعیت خود در ساختار کامل آلیاژ میشود، ۴) آلیاژهای هویسلر معکوس که در این دسته یکی از اتمهای X مشمول تغییر موقعیت نسبت به موقعیت خود در ساختار کامل آلیاژ میشود، ۴) آلیاژهای هویسلر معکوس که در این دسته یکی از اتمهای X مشمول تغییر موقعیت نسبت به موقعیت نیمه هویس کامل آلیاژ میشود، ۶) آلیاژهای هویسلر و جهارتایی به فرم XYZX. آلیاژهای هویسلر در دستگاههای الکترونیکی، مغناطیسی دند سنسورهای مغناطیسی، دستگاههای ترموالکتریک، اسپینترونیک استفاده می شوند. همچنین به علت قابلیت این مواد در مانند سنسورهای مغناطیسی، دستگاههای ترموالکتریک، اسپینترونیک استفاده می شوند. همچنین به علت قابلیت این مواد در مانند سنسورهای مغاطیسی، دستگاههای ترموالکتریک، اسپینترونیک استفاده می شوند. همچنین به علت قابلیت این مواد در مانند سند و از ژی و باتوجه به مشکل محدودیت در استفاده از سوخت های فسیلی و پیشرفت جوامع امروزی برای انجام محاسبات دخیره ی انرژی تبادل–همبستگی تحمین زده شده است و در نهایت پایداری ساختاری و دینامیکی شبکه مورد تایید قرار گرفته اند. در این پروژه از تئوری تابع چگالی برای انجام محاسبات استفاده از سازژی ترکیبات بیشتر موردتوجه قرار گرفته اند. در این پروژه از تروی ساختاری و دینامیکی شبکه مورد تایید قرار گرفته است. [1-1]

۲-روش انجام محاسبهها

برای انجام محاسبات خود از نرمافزار کوانتوم اسپرسو استفاده کردیم که برپایهی تئوری تابع چگالی اجرا میشود. برای بررسی پایداری ساختاری، دینامیکی از کدهای alamode ، Thermo-pw در این بستر بهره گرفته شد. همچنین، تجسم ساختار بلوری با نرمافزار Xcrysden صورت گرفت. پارامترهای محاسباتی به شرح زیر تنظیم شدند: انرژی قطع تابع موج در ۸۰ Ry و انرژی قطع گسترش چگالی بار در ۳۸۰ Ry تنظیم شده و ساختارهای شبکه با عدم قطعیت انرژی لا ۲۰۱۰ × ۱ بهینهسازی شدند. در محاسبات دینامیکی از کدهای alamode و phonopy استفاده کردیم و از یک سوپرسل ۲×۲×۲ با k نقاط برابر با ۱۲×۱۲×۱۲ برای نمونهبرداری از اولین منطقه بریلوئن استفاده شد. برای محاسبات ساختاری از کد Thermo-pw بهره گرفتیم و q مش ها برابر با ۱۶×۱۶×۱۶ در نظر گرفته شدند.

داسکاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ مان ۱۴۰۳

۳- بحث و نتايج

آلیاژهای هویسلر معکوس با فرمول شیمیایی X₂YZ دارای ساختار بلوری مکعبی وجه مرکزی F-43m با گروه فضایی (۲۱۶) هستند. موقعیتهای وایکوف عناصر X، Y و Z به ترتیب (۲/۱، ۲/۱، ۲/۱، ۲/۱، ۴/۱، ۲/۱، X/۱، (۰، ۰، ۲/۰، (۳/۴، ۲/۴، Z(۳/۴ میباشند. نتایج محاسبات انرژی کل با استفاده از روش Thermo-pw (شکل ۱-الف) نشان میدهند که این آلیاژ در ساختار هویسلر معکوس پایدار است. در شکل ۱-ب) ساختار بلوری ترکیب هویسلر Li₂BAg مشاهده میشود. برای بررسی پایداری دینامیکی، چگالی حالتهای فونون (DOS) و منحنیهای پراکندگی فونون (شکل ۱-ج و ۱-د) محاسبه شدند. مقادیر مثبت فرکانسهای فونون نشاندهنده پایداری دینامیکی ساختار هویسلر معکوس است.



شكل۱-الف)منحني انرژي برحسب حجم، ب)ساختار بلوري آلياژ، ج)منحني چگالي فونوني، د)منحني

۴– نتیجه گیری

نتایج محاسبات نشان میدهند که آلیاژ هویسلر Li2BAg ، در ساختار معکوس خود پایدار است. منحنیهای پراکندگی فونون و چگالی حالتهای فونون، نبود فرکانسهای منفی را تأیید میکنند که نشاندهنده پایداری دینامیکی ساختار است. همچنین،



وجود یک شکاف انرژی قابل توجه بین حالتهای فونونی و فوتونی منجر به کاهش قابل توجه رسانایی حرارتی شبکه می شود که این ویژگی، آلیاژLi2BAg را به یک کاندید مناسب برای کاربرد در دستگاههای ترموالکتریک تبدیل می کند.

منابع و مراجع

[1] Husain, M. *et al.* Predicting structural, optoelectronic and mechanical properties of germanium based AGeF₃ (A= Ga and In) halides perovskites using the DFT computational approach. *Opt. Quantum Electron.* **55**, 536 (2023).

[2] Tavares, S., Yang, K., & Meyers, M. A. (2023). Heusler alloys: Past, properties, new alloys, and prospects. *Progress in Materials Science*, *132*, 101017.

[3] Mahmoudi, S., Golzan, M. M., & Nemati-Kande, E. (2024). Crystal structure, stability, and transport properties of Li2BeAl and Li2BeGa Heusler alloys: a DFT study. *Scientific Reports*, 14(1), 12201.



بررسی نظری ویژگیهای ساختاری و دینامیکی آلیاژ هویسلر معکوس Li₂AlAg

پریا نصیرزاده'*، ابراهیم نعمتی کنده'، سیما محمودی"

۱ - دانشجو، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه ارومیه
 ۲ - دانشیار ، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه ارومیه، رایانامه: e.nemati@urmia.ac.ir
 ۲ - دکتر، رشته فیزیک ماده چگال، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه

واژگان کلیدی: ترکیبات هویسلر معکوس، تئوری تابع چگالی، ویژگیهای دینامیکی

۱– مقدمه

آلیاژهای هویسلر، ترکیبهای بین فلزی با ساختار بلوری منظم، نخستین بار در سال ۱۹۰۳ توسط فردریش هویسلر کشف شدند. اولین ترکیب شامل فلزهای مس، منگنز و آلومینیوم بود که به صورت مجزا ویژگیهای مغناطیسی ندارند، اما پس از آلیاژسازی، ویژگیهای مغناطیسی جالب توجهی از خود نشان میدهند. [1] ویژگیهای منحصر به فرد آلیاژهای هویسلر از جمله ابررسانایی الکتریکی، رسانایی حرارتی پایین و ویژگیهای ترموالکتریک برجسته، این مواد را به گزینههای مناسبی برای کاربرد در صنایع الکترونیک، ترموالکتریک و اسپینترونیک تبدیل کرده است[2] . در این پژوهش، از محاسبههایی که برپایهی نظریهی تابع چگالی هستند، برای تحلیل ویژگیهای ساختاری و دینامیکی آلیاژ هویسلر معکوس Li2AIA استفاده شده است. نتایج به دست آمده نشان داد که ساختار این آلیاژ درحالت بلوری هویسلر معکوس پایدار است. پایداری دینامیکی آلیاژ براساس محاسبههای فونونی تایید شد.

۲-روش انجام محاسبهها

در این پژوهش، از نرمافزارها و کدهای مختلفی، از جمله نرمافزار کوانتوم اسپرسو که برپایهی نظریه تابع چگالی میباشد برای محاسبه ویژگیهای ساختاری و دینامیکی شبکه استفاده شده است. برای محاسبهی انرژی تبادلی-همبستگی، تقریب GGA به کار گرفته شد. همچنین نرمافزارهای alamode ،Thermo-pw و phonopy برای محاسبهی پایداری دینامیکی شبکه، از طریق چگالی حال گرفته شد. همچنین نرمافزارهای glamode ،Thermo-pw و phonopy برای محاسبهی پایداری دینامیکی شبکه، از طریق چگالی کار گرفته شد. همچنین نرمافزارهای glamode ، Thermo-pw و محاسبهی انرژی تبادلی محاسبهی پایداری دینامیکی شبکه، از طریق چگالی حالتهای فونونی و منحنی پراکندگی فونونها، مورد استفاده قرار گرفتند. ساختار بلوری آلیاژ نیز با استفاده از نرمافزار چگالی حالتهای فونونی و منحنی پراکندگی فونونها، مورد استفاده قرار گرفتند. ساختار بلوری آلیاژ نیز با استفاده از نرمافزار چگالی حالتهای فونونی و منحنی پراکندگی فونونها، مورد استفاده قرار گرفتند. ساختار بلوری آلیاژ نیز با استفاده از نرمافزار و چگالی حالتهای فونونی و منحنی پراکندگی فونونها، مورد استفاده قرار گرفتند. ساختار بلوری آلیاژ نیز با استفاده از نرمافزار و چگالی حالتهای فونونی و منحنی پراکندگی فونونها، مورد استفاده قرار گرفتند. ساختار بلوری آلیاژ نیز با استفاده از نرمافزار و چگالی بار در ۲۹ ۲۰۰ و ساختارهای شبکه با عدم قطعیت انرژی R۷^{-۱۰} ۲۰ × ۱ بهینه سازی شدهاند. در محاسبات alamode شده مده محانین در محاسبات g محاسبات g مدا ۲۵ ×۲۱×۲۲ نقطه k برای مدل سازی اولین منطقه بریلوئن استفاده شده است. همچنین در محاسبات Thermo-pw از تعداد نقاط ۲۵×۸×۸ می استفاده شده است.

۳- بحث و نتایج

آلیاژهای هویسلر معکوس با فرمول شیمیایی X2YZ دارای ساختار بلوری F-43m با گروه فضایی (۲۱۶) هستند. موقعیتهای وایکوف عناصر X ، Y و Z به ترتیب (۲/۴، ۳/۴، ۲/۴، ۸/۲۱، ۲/۱، ۲/۱، ۲/۱، ۲/۱، ۹/۲) و (۲/۴، ۱/۴، ۲/۴) میباشند. طبق نتایج محاسبههای Thermo-pw که در شکل ۱-الف) آورده شده است، مقادیر انرژی، منفی به دست آمده که ثابت میکند این آلیاژ در ساختار هویسلر معکوس پایدار میباشد. در شکل ۱-ب) ساختار بلوری ترکیب هویسلر Li₂AlAg مشاهده میشود. برای بررسی پایداری دینامیکی آلیاژهای هویسلر Li₂AlAg ، چگالی حالتهای فونون (شکل۱-ج)) و منحنیهای پراکندگی فونون (شکل۱-د)) محاسبه شده است. آلیاژهای هویسلر دارای دوازده مد فونون در هر بردار موج هستند که شامل سه مد صوتی و نه مد نوری است، زیرا هر واحد سلول آلیاژ دارای چهار اتم است. فرکانسهای مثبت در منحنیها نشان میدهد این ترکیب در ساختار هویسلر معکوس از لحاظ دینامیکی پایدار میباشد.

عهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳



شکل۱-الف)منحنی انرژی برحسب حجم، ب)ساختار بلوری آلیاژ، ج)منحنی چگالی فونونی، د)منحنی

۴– نتیجه گیری

نتایج به دست آمده نشان میدهند که آلیاژ هویسلر Li₂AlAg در ساختار معکوس خود پایدار است. همچنین منحنیهای پراکندگی فونونی و چگالی حالتهای فونونی دارای مقادیر مثبت در فرکانسها میباشند که پایداری دینامیکی آلیاژ مورد مطالعه را تایید میکنند. نتیجهی قابل توجه دیگری که میتوان از منحنیهای چگالی و پراکندگی فونونی به دست آورد، پایین بودن رسانایی حرارتی شبکه است که کاربرد آن را در دستگاههای ترموالکتریک بسیار امیدوارکننده میسازد، چراکه مدهای ارتعاشی فونونی و حالتهای فوتونی دارای گاف نواری قابل ملاحظهای هستند و در نتیجه انتقالات فونون احتمال بسیار کمتری قابل انجام است.



منابع و مراجع

[1] Tavares, S., Yang, K., & Meyers, M. A. (2023). Heusler alloys: Past, properties, new alloys, and prospects. *Progress in Materials Science*, 132, 101017.

[2] Mahmoudi, S., Golzan, M. M., & Nemati-Kande, E. (2024). Crystal structure, stability, and transport properties of Li2BeAl and Li2BeGa Heusler alloys: a DFT study. *Scientific Reports*, *14*(1), 12201.



مطالعه ترمودینامیکی اثر داروی آمانتادین روی میسل شدن سورفکتانت ستیل پریدینیوم کلرید براساس اندازه گیری های هدایت سنجی

سیده فاطمه نورانی خمیرانی^۱،بهرام قلمی چوبر^{۲، *}

۱ -دانشجو دکتری، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی کاربردی، دانشکده شیمی دانشگاه گیلان Sf.noorani@yahoo.com ۲ و * نویسنده مسئول :استاد شیمی فیزیک، گروه شیمی کاربردی، دانشکده شیمی دانشگاه گیلان B-ghalami@guilan.ac.ir

واژگان كليدى: أمانتادين، ميسل شدن، سورفكتانت، ستيل پريدينيوم كلريد، هدايت سنجى.

۱–مقدمه

برهم کنش سورفکتانت و دارو در حوزه های مختلف مانند شیمی فیزیک و دارو رسانی بسیار اهمیت دارد. سورفکتانت ها ترکیباتی هستند که به دلیل ساختار دوگانه خود قابلیت افزایش حلالیت و نفوذ پذیری داروها را دارند. این برهم کنش میتواند روی جذب و اثر داروها موثر باشد در مطالعه برهم کنش سورفکتانت با دارو تعیین غلظت بحرانی میسل شدن (CMC)مهم است و به نوع سورفکتانت و خواص فیزیکی و شیمیایی دارو و شرایط محیطی مانند دما ،PH و الکترولیت بستگی دارد.ستیل پریدینیوم کلرید(CPC) یک نمک آمونیوم چهارتایی است که به عنوان یک نوع سورفکتانت کاتیونی و یک ماده ضد میکروبی به طور گسترده در محصولات بهداشتی و دارویی استفاده میشود. آمانتادین یک نوع الماس واره می باشد که به عنوان داروی بیماری های عصبی نظیر پارکینسون و آلزایمر استفاده می شود. در سال های اخیر مطالعات زیادی روی برهم کنش دارو و سورفکتانت انجام شده است[1]. قلمی و همکاران در سال ۲۰۲۴برهم کنش سورفکتانتهای سدیم دو دسیل سولفات و ستیل تری متیل آمونیوم برومید را با داروی آمانتادین در محلولهای آبی با استفاده از اندازه گیریهای هدایت می دو دسیل سولفات و ستیل تری متیل آمونیوم مورد مطالعه قرار دادند[2]. امین حسین و همکاران در سال ۲۰۲۴ مطالعه بررسی برهمکنش برمید تترادسیل تری متیل آمونیوم (TTAB) با داروی آنتی بیوتیک، سفیکسیم تری هیدرات پرداختند[3].

۲- روش کار

در این پژوهش محلول هایCPC در غلظت های مختلف از آمانتادین تهیه شد وCMC آن به روش هدایت سنجی در دماهای مختلف براساس روش افزایش استاندارد تعیین شد.



۳-بحث و نتیجه گیری

در این تحقیق نقطه CMC برای سورفکتانتCPC در غلظت های مختلف از داروی آمانتادین در دماهای۲۰۸٬۲۹۸٬۲/۲۹۸٬۲/کلوین به روش هدایت سنجی تعیین شد و همچنین مقادیر درجه تفکیک سورفکتانت ، انرژی آزاد گیبس میسل شدن محاسبه شد و برای دو نمونه غلظتی دارو در جدول ۱ گزارش شد.

جدول۱-تغییرات درجه تفکیک،CMC و انرژی آزادگیبس برای سامانه آب+آمانتادین+CPC در دمای۲۹۸/۲					
غلظت آمانتادین (mol kg ⁻¹)	CMC (mM)	α	$\Delta G^{0}_{(kJ.mol^{-1})}$		
(moning)	T=2	98.2			
0.000	1.09	0.59	-42.83		
0.001	0.69	0.68	-50.30		

نتایج نشان داد که در بررسی برهم کنش آمانتادین با سورفکتانت CPC، با افزایش غلظت آمانتادین هدایت ویژه کاهش می یابد(نمودار ۱ الف) و با افزایش دما ، هدایت ویژه افزایش می یابد (نمودار ۱ ب).



نمودار ۱:الف) تغییرات هدایت ویژه CPC در مخلوط حلالی با غلظت های ۱و۲۰۰۱.مولال از آمانتادین در دمای ۳۰۸/۲ کلوین ب) تغییرات هدایت ویژه CPC در مخلوط حلالی با غلظت ۲۰۰۱. مولال از آمانتادین در دما های ۲۹۸/۲، ۳۰۸/۲ و ۳۱۸/۲ کلوین

نتایج تحقیق نشان داد که با افزایش غلظت آمانتادین نقطه CMC سورفکتانت CPC کاهش می یابد، ولی با افزایش دما نقطه CMC برای سورفکتانت CPC افزایش می یابد.

منابع و مراجع

[1] Rubingh, D.N., 1979. Mixed micelle solutions. In *Solution Chemistry of Surfactants: Volume 1* (pp. 337-354). Boston, MA: Springer New York.

[2]Shamizad, F., Ghalami-Choobar, B., Ashtari-Delivand, M., & Mashatooki, M. H. (2024). Interaction of sodium dodecyl sulfate and cetyl trimethyl ammonium bromide surfactants with amantadine drug in aqueous solution: Conductometric and molecular dynamics studies. *Journal of Molecular Liquids*, 397, 124072.

[3]Anis-Ul-Haque, K. M., Hossain, M. A. A., Ferdous, M. J., Taher, M. A., Khan, J. M., Ahmad, A., ... & Hoque, M. A. (2024). The micellization of tetradecyltrimethylammonium bromide and cefixime trihydrate mixture:



investigation of the effects of sodium-based electrolytes and temperatures on the physico-chemical parameters and interaction forces. *Molecular Physics*, 122(4), e2253931.



تجزیه و تحلیل کامل صور تبندی و مطالعه پیوند هیدروژنی درون مولکولی در ترکیبات اکراتوکسین و فنیلآلانین

عبدالرضا نكوئى"*، پروين نوربخش ۲

۱ و *- نویسنده مسئول: دانشیار، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز، nekoei@sutech.ac.ir ۲- کارشناسی ارشد، رشته شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شیراز، p.nourbakhsh@sutech.ac.ir

واژگان كليدى: اكراتوكسين آ، فنيل آلانين، پيوند هيدروژنى درون مولكولى

۱– مقدمه:

اکراتوکسین آ (OTA) از شایعترین و سمیترین مایکوتوکسینها و جزء پنج سم آلودهکننده محصولات کشاورزی است. این سم در رژیم غذایی معمولی و مواد غذایی با منشاء حیوانی و همچنین شیر، از جمله شیر مادر در انسان وجود دارد. نکته قابل توجه، انتقال آن از طریق جفت به جنین است. قرار گرفتن مکرر حیوانات یا انسان در معرض OTA ممکن است باعث ایجاد طیف وسیعی از بیماریها از جمله نفروپاتی، سرطان، اختلال حرکتی، سمیت مغز و اختلال حافظه شود [1]. ساختار OTA ممکن است باعث ایجاد طیف وسیعی از بیماریها از جمله نفروپاتی، سرطان، اختلال حرکتی، سمیت مغز و اختلال حافظه شود [1]. ساختار OTA ممکن است باعث ایجاد منعی از بیماریها از جمله نفروپاتی، سرطان، اختلال حرکتی، سمیت مغز و اختلال حافظه شود [1]. ساختار OTA می منتار کرتی، می میت مغز و اختلال حافظه شود [1]. ساختار OTA منتار معتمکل از فنیل آلانین و بخش ایزوکومارینی است که توسط یک پیوند آمیدی به یکدیگر متصل شدهاند. فنیل آلانین (Phe) نقش کلیدی در بیوسنتز اسیدهای آمینه دیگر ایفا می کند و در ساختار و عملکرد بسیاری از پروتئینها و آنزیمها نقش داشته و برای ساختی است [7].

۲-روش:

در ابتدا مولکول OTA به دو قسمت Phe و ایزوکومارینی شکسته شد و به منظور تجزیه و تحلیل کامل صورتبندی OTA و هم چنین بخشهای آن، از محاسبات نظری و روشهای مکانیک کوانتومی، از جمله روشهای PP2 و نظریه تابعی دانسیته DFT، بهره گیری شد. از میان سطوح مختلف نظریه DFT، از سطوح B3LYP و مجموعه پایهای (d,p)+++G(d,p-6-311 بهره گیری شد. از میان سطوح مختلف نظریه DFT، از سطوح B3LYP و مجموعه پایهای (d,p) (d,p) در نرم افزار گوسین نسخه ۹ استفاده شد و پایدارترین فرمها به دست آمده است. به علاوه برای بررسی ساختارهای اولیه و خواص ساختارهای محاسبه شده از نرم افزار گوسین نسخه ۹ استفاده شد و پایدارترین فرمها به دست آمده است. به علاوه برای بررسی ساختارهای اولیه و خواص ساختارهای محاسبه شده از نرم افزار گوسین نسخه ۹ استفاده شد و پایدارترین فرمها به دست آمده است. به علاوه برای بررسی ساختارهای اولیه و خواص ساختارهای محاسبه شده از نرم افزار گوس ویو استفاده شد. قدرت انرژی پیوند هیدروژنی درون مولکولی(HB) در اسختارهای پایدار برینی بخشای استارهای شوستر و AIM محاسبه شده از نرم افزار گوسی دار و و محموعه پایهای (d,d) (

۳-بحث و نتايج:

برای آنالیز کانفورمرهای ترکیب اکراتوکسین OTA در ابتدا این مولکول از قسمت پیوند آمیدی به دو بخش فنیل آلانین و ایزوکومارینی شکسته شد. بهینه سازی روی ۲۴ کانفورمر محتمل قسمت Phe انجام شد. هم چنین جهت گیری مختلف جفت ناپیوندی NH₂ نیز برای این ترکیب مورد بررسی قرار گرفت. در نهایت سه کانفورمر پایدار C2، C7 و A2 مشخص شدند. در بخش ایزوکومارینی ۱۸ تاتومر و کانفورمر ممکن تعیین و بهینه سازی برای همه آنها انجام و سه فرم پایدار D3 و D2،D1 و مشخص شدند. شدی را نشان می دهد.



در مرحله بعد، بین کانفورمرهای پایدار دو بخش Phe و ایزوکومارینی، پیوند آمیدی برقرار و ۹ کانفورمر پایدار ایجاد شد. برای یافتن زوایای مناسب محل اتصال دو بخش مذکور، محاسبات اسکن صورت گرفت و با رسم نمودارهای سطوح انرژی پتانسیل (PES)، نقاط مینیمم انرژی برای همه کانفورمرهای مورد بررسی OTA به دست آمد. با انجام محاسبات بهینه سازی کامل در همه نقاط مینیمم، پایدارترین کانفورمر محک مورد بررسی OTA به دست آمد. با انجام محاسبات بهینه سازی کامل در (PES)، نقاط مینیمم انرژی برای همه کانفورمرهای مورد بررسی OTA به دست آمد. با انجام محاسبات بهینه سازی کامل در العام مینیمم، پایدارترین کانفورمر OTA مشخص گردید که ساختار آن در شکل ۲ داده شده است. در نهایت و برای اطمینان از صحت نتیجه بدست آمد، یک محاسبه اسکن برای زاویه چرخش حول پیوند N₁₁ در ساختار مذکور انجام پزیرفت و کمینه بودن انرژی این ساختار تایید گردید.



شکل ۲: پایدار ترین ساختار بدست آمده برای مولکول OTA

همچنین، با توجه به اهمیت پیوند هیدروژنی در سمیت OTA، پیوندهای هیدروژنی موجود در هر کدام از ساختارهای پایدار بخشهای Phe و ایزوکومارینی به صورت جداگانه، و در ترکیب OTA، مورد بررسی قرار گرفت. به دلیل برخی تداخلهای فضایی در روش شوستر [۳] و ایراد آن در پیش بینی انرژی پیوند هیدروژنی، از روش اسپینوسا [۴] نیز استفاده شد.

۴- نتیجهگیری

با بهره گیری از محاسبات DFT بهترین و پایدارترین ساختار Phe و OTA مشخص شد و انرژی پیوندهای هیدروژنی -O8 و OTA و H14···O1 و N11-H17···O4 و V1-H17···O4 و A/۶ کیلوکالری بر مول بدست آمده است. با توجه به دسته بندی روزاس و همکاران [۵]، این پیوندهای هیدروژنی، به ترتیب، در دسته ضعیف و متوسط قرار می گیرند.

منابع و مراجع:

[1] Nourbakhsh, F. and E. Tajbakhsh, Neurotoxicity mechanism of Ochratoxin A. Quality Assurance and Safety of Crops & Foods, 2021. 13(2): p. 34-45.

[2] Matthews, D.E., An overview of phenylalanine and tyrosine kinetics in humans. The Journal of nutrition, 2007. 137(6): p. 1549S-1555S.



[3] Schuster, P., G.F. Zundel, and C. Sandorfy, The Hydrogen bond: recent developments in theory and experiments. (No Title), 1976.

[4] Espinosa, E., et al., Topological analysis of the electron density in hydrogen bonds. Acta Crystallographica Section B: Structural Science, 1999. 55(4): p. 563-572.

[5] Rozas, I., I. Alkorta, and J. Elguero, Behavior of ylides containing N, O, and C atoms as hydrogen bond acceptors. Journal of the American Chemical Society, 2000. 122(45): p. 11154-11161.



مدلسازی و مطالعه دینامیک مولکولی برای جلوگیری از انباشتگی پروتئین آمیلوئیدبتا به کمک مهارکننده در بیماری آلزایمر

مهشید نیازی، سیفاله جلیلی، آتنا پاکزادیان

۱ و ۱- نویسنده مسئول: کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و خواجه نصیرالدین طوسی، (mahi.niyazi2000@email.kntu.ac.ir) ۲-استاد تمام، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و خواجه نصیرالدین طوسی، (sjalili@kntu.ac.ir) ۳- پسادکتری، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، شیمی و خواجه نصیرالدین طوسی، (a.pakzadiyan@email.kntu.ac.ir)

واژگان كليدى: بيمارى ألزايمر، پروتئين أميلوئيدبتا، شبيەسازى ديناميك مولكولى، مهاركنندە، دارو

۱– مقدمه

بیماری آلزایمر یک اختلال عصبی پیشرونده است که با تشکیل تجمعات پروتئینی نامحلول و همچنین ازدستدادن سیناپسها، مرگ انتخابی نورونها، ازدستدادن انتقال دهندههای عصبی و التهاب عصبی همراه است. علی رغم تلاشهای فراوان جامعه علمی، علت دقیق این بیماری و مکانیسمهای دقیق منجر به این تغییرات هنوز کشف نشده و همچنین درمان قطعی برای آن وجود ندارد و اکثر داروهای موجود فقط علائم را به طور موقت کاهش می دهند [۱]. بر اساس فرضیه آبشار آمیلوئید که به طور گسترده پذیرفته شده است، تا شدن و تجمع نادرست پپتیدهای آمیلوئید علت اصلی بیماری آلزایمر است که پلاکهای تشکیل شده از آن در بافت مغز بیماران مبتلا به این بیماری یافت می شود. در بیماری آلزایمر پاکسازی پروتئین آمیلوئیدبتا میشوند. یکی از راههای رایج طراحی داروهای مؤثر در درمان آلزایمر، استفاده از مولکولهای کوچک آلی به عنوان مهارکننده میشوند. یکی از راههای رایج طراحی داروهای مؤثر در درمان آلزایمر، استفاده از مولکولهای کوچک آلی به عنوان مهارکننده میشوند. یکی از راههای رایج طراحی داروهای مؤثر در درمان آلزایمر، استفاده از مولکولهای کوچک آلی به عنوان مهارکننده میموند. یکی از راههای رایج طراحی داروهای مؤثر در درمان آلزایمر، استفاده از مولکولهای کوچک آلی به عنوان مهارکننده میدفمند در بخشهای مختلف مولکول اصلی انجام شد تا تعادلی بهینه میان بازدارندگی تجمع آمیلوئیدبتا و پروتئین تاو و همچنین توانایی عبور از سد خونی – مغزی ایجاد شود [۳]. در این مطالعه، هدف ما بررسی مکانیسم برهمکنش یک مهارکننده میتنی بر تیوفن است که در مطالعات آزمایشگاهی اثرات بازدارندگی مؤثری در برابر فیبریلهای پروتئین آمیلوئیدبتا به عنوان میتنی بر تیوفن است که در مطالعات آزمایم، نشان دادهاست که میتواند به توسعه درمانهای مؤثرتر برای بیماری آلزایمر، نین

۲- روش

فرایند داکینگ مولکولی ساختار پروتئین و مهارکننده به کمک نرم افزار اتوداک وینا نسخه ۱.۱.۲ و تمامی شبیهسازیهای دینامیک مولکولی با استفاده از نرمافزار گرومکس نسخه ۲۰۲۲.۱ صورت گرفت. شبیهسازی برهمکنش ساختار اولیه پروتئین و مهارکننده انتخابی در یک جعبه مکعبی شبیهسازی با ابعاد ۷ نانومتر انجام شد. برای همه سیستمها از میدان نیروی Charmm36m و برای حلال آب از مدل TIP3P استفاده شد. برای مدل سازی برهم کنش های برد بلند، از روش PME استفاده شد و شرایط مرزی متناوب در تمام جهات رعایت گردید. تمام شبیه سازی ها در این پژوهش در ۱۰۰ نانوثانیه انجام شده است.

وانسكاه اصفيان ٢٩ و ٣٠ باريان ١٤٠٣

۳- بحث

برای بددست آوردن ساختار اولیه، با جستجو در بانک اطلاعاتی پروتئین، کد پروتئینی BEG برای ساختار افیبریل آمیلوئیدبتا و از میان ترکیبات آلی مبتنی بر تیوفن، ترکیب ۷ بهعنوان مهارکننده انتخاب شد[۴]. مطابق شکل ۱ قسمت الف، تغییرات RMSD برای پروتئین آمیلوئیدبتای تنها و کمپلکس حاصل از اتصال پروتئین و مهارکننده ۷ مورد بررسی قرار گرفت. همانطور که مشاهده میشود، با افزایش زمان، نمودار مربوط به پروتئین به حالت پایداری رسیده و تغییرات قابل توجهی در آن دیده نمیشود که نشاندهنده پایداری ساختاری پروتئین در طول شبیهسازی است. با این حال، مقدار RMSD در نمودار مربوط به کمپلکس پروتئین و مهارکننده ۷ افزایش یافته و نوسانات قابل توجهی دارد که این نشاندهنده این است که با افزودهشدن مهارکننده به پروتئین، ناپایداری ساختاری در سیستم ایجاد شده است. این ناپایداری میتواند به دلیل تغییرات ساختاری ایجاد شده در محل اتصال پروتئین با مهارکننده باشد. علاوه براین، مطابق شکل ۱ قسمت ب، مقادیر تغییرات ساختاری ایجاد تعیین پایداری سیستم محاسبه شد. بخشهایی با مقادیر RMSF بالا پویاتر و با پایداری میتواند به دلیل تغییرات ساختاری ایجاد آمیلوئیدبتای متصل به مهارکننده در مقایسه با آمیلوئیدبتای غیر متصل در طی شبیه سازی، پویاتر و دارای مقادیر تو برای آمیلوئیدبتای متصل به مهارکننده در مقابل ساختار فیبریل غیرمتصل است. مقادیر شعاع ژیراسیون (ROS) برای ایزبابی آمیلوئیدبتای متصل به مهارکننده در مقابل ساختار فیبریل غیرمتصل است. مقادیر شعاع ژیراسیون (ROS) برای ارزبابی آمیلوئیدبتای متصل به مهارکننده در مقابل ساختار فیبریل غیرمتصل است. مقادیر شعاع ژیراسیون (ROS) برای ارزبابی آمیلوئیدبتای مین ده مای کنده در مقابل ساختار فیبریل غیرمتصل است. مقادیر شعاع ژیراسیون (ROS) برای ارزبابی آمیلوئیدبتای می در مقابل ساختار فیبریل می مندل در طی شبیه سازی یو باید می داری مقادیر ای ایزبابی ابان در اره می در در این ارزبابی شد. یک پروتئین تاشده پایدار در طول زمان شبیه سازی یک ROS ثابت را حفظ می کند. شکل ۱ ناباشتگی ساختاره ارزبابی مدنده نها و ساختار فیبریل متصل به مهارکننده را نشان می دهد. افزایش قابل توجه در این پارامتر برای فیبریلهای متصل به مهارکنده نشانده نهان می ماندر ای ناپرید و نه نابانتگی ساختار فیبریل با تصال مهارکنده ایجاد شدی نانده نشانده نای نحی یک ناپایداری ساختاری و زمان شدیا می با



شكل ۱ – الف) نمودار تغييرات RMSD ب) نمودار تغييرات RMSF ج) نمودار تغييرات شعاع ژيراسيون (RoG)

۴- نتیجهگیری

در این پژوهش، نتایج شبیهسازی دینامیک مولکولی بهعنوان تأییدی بر دادههای تجربی مورد استفاده قرار گرفتند. با توجه به نتایج شبیهسازیها اتصال مهارکننده به ساختار فیبریل آمیلوئیدبتا باعث کاهش پایداری سیستم میشود. نتایج ما علاوه بر اینکه نشاندهنده اتصال موفقیتآمیز لیگاند به پروتئین هستند، بلکه بر توانایی لیگاند در بی ثبات کردن فیبریلهای از پیش تشکیل شده آمیلوئیدبتا و فع انباشتگی آنها به عنوان یک عامل مهم و بالقوه در ایجاد بیماری آلزایمر نیز تأکید دارند.



منابع و مراجع

[1] Malafaia, D., Albuquerque, H. M., & Silva, A. M. (2021). Amyloid- β and tau aggregation dual-inhibitors: A synthetic and structure-activity relationship focused review. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 214, 113209.

[2] Agrawal, N., & Skelton, A. A. (2019). Structure and function of Alzheimer's amyloid βeta proteins from monomer to fibrils: a mini review. The protein journal, 38, 425-434.

[3] Job, N., Thimmakondu, V. S., & Thirumoorthy, K. (2023). In silico drug design and analysis of dual amyloidbeta and tau protein-aggregation inhibitors for Alzheimer's disease treatment. *Molecules*, 28(3), 1388.

[4] Fuse, S., Matsumura, K., Fujita, Y., Sugimoto, H., & Takahashi, T. (2014). Development of dual targeting inhibitors against aggregations of amyloid- β and tau protein. European journal of medicinal chemistry, 85, 228-234.



دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آیان ۱۴۰۳

مجتبى على پور' **، فاطمه وزيرى علمدار لو ً.

۱ و ^{*}- نویسنده مسئول: استاد، رشته شیمی فیزیک، بخش شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز (malipour@shirazu.ac.ir) ۲- دانشجو، رشته شیمی فیزیک، بخش شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز (fateme1996vaziri@gmail.com)

واژگان کلیدی: شکافت ناهمسان، فسفرسانس دمای اتاق، سیستم میزبان - میهمان، تابعی محدوده مجزا، تنظیم بهینه.

۱– مقدمه

(1)

شکافت ناهمسان فرآیندی است که در آن اکسیتون یکتایی از طریق فرآیند انتقال بار بینمولکولی به اکسیتونهای سهتایی تبدیل میشود. یک نمونه از شکافت ناهمسان مربوط به سیستمهای میزبان – میهمان میباشد، جایی که چنین سیستمهایی با تنظیم برهمکنش بین مولکولهای میزبان و میهمان میتوانند جهت تشریح فسفرسانس دمای اتاق با کارایی بالا و طول عمر قابل ملاحظه مورد استفاده قرار گیرند (2022 ,An et al.). معیار مهم انرژی برای فرآیند شکافت ناهمسان فسفرسانس دمای اتاق بر اساس رابطه (۱) بیان میشود (Sun et al., 2023):

 E_{host} (S₁) $\approx E_{\text{host}}$ (T₁) + E_{guest} (T₁)

 E_{guest} (T₁) و E_{host} (T₁) و E_{host} (T₁) و E_{host} (T₁) و E_{host} (S₁) تارژی حالت های برانگیخته یکتایی و سهتایی میزبان و E_{host} (T₁) انرژی حالت برانگیخته یمیریدی محدوده مجزا با تنظیم بهینه در چارچوب نظریه تابعی های هیبریدی از با تنظیم بهینه در چارچوب نظریه تابعی چگالی جهت توصیف فرآیند شکافت ناهمسان فسفرسانس دمای اتاق براساس رابطه (۱) و همچنین برای طراحی سیستمهای مربوطه توسعه داده میشود.

۲- روش

ساختار شیمیایی جفت مولکولهای تشکیلدهنده یکی از سیستمهای میزبان - میهمان مورد مطالعه به همراه نام اختصاری آنها در شکل ۱ نشان داده شده است. سایر ساختارهای مورد مطالعه نیز در مرجع (Sun et al., 2023) موجود هستند.



شکل ۱ : ساختار شیمیایی مولکولهای تشکیلدهنده یکی از سیستمهای میزبان (آبی) – میهمان (قرمز) مورد مطالعه.

تابعیهای هیبریدی محدوده مجزا دارای پارامترهای تنظیمپذیری هستند. در این تابعیها، سهمهای تبادلی هارتری – فاک در نواحی کوتاه – برد و دور – برد به ترتیب با ضریبهای α و α + β مشخص میشود. همچنین، مقادیر پارامتر محدوده مجزا، *μ*، از طریق کمینه کردن یک تابع هدف به صورت زیر به دست میآید:

دانتگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ بان ۱۴۰۳

$$J^{2} = \sum_{i=0}^{1} \left[\varepsilon_{\text{HOMO}}^{\mu} \left(N + i \right) + \mathrm{IP}^{\mu} \left(N + i \right) \right]^{2}$$
(7)

که در آن _{HOMO} انرژی بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده، IP پتانسیل یونش و N تعداد الکترونهای سیستم است. در این مطالعه مقادیر ۰٪ تا ۵۰٪ با فاصله ۱۰٪ برای تبادلی هارتری – فاک کوتاه – برد (α) و همچنین مقادیر پارامتر محدوده مجزا بین ۲۰/۵ تا ۱۳۰۰ با فاصله ۲۰/۵ (بر حسب Bohr⁻¹) در نظر گرفته شد. همچنین، شرط رفتار صحیح مجانبی + α مجزا بین ۱۰/۵ تا ۱۳۰۰ با فاصله ۲۰۵۵ (بر حسب Bohr⁻¹) در نظر گرفته شد. همچنین، شرط رفتار صحیح مجانبی + α اعمال شده است. از تقریبهای تابعی چگالی مختلف BLYP، BE و TPSS و مجموعه پایه (G)-31+66 استفاده شده است. اثرات حلال نیز با استفاده از مدل پیوسته قطبشپذیر بر اساس فرمولبندی معادله انتگرال مورد استفاده قرار گرفت. تمام محاسبات مربوط به روشهای توسعه داده شده در نرم افزارهای GAUSSIAN09 و ORCA اجرا شده است.

۳- بحث

تنظیم بهینه پارامتر محدوده مجزا برای تمام جفت مولکولهای مورد نظر در سیستمهای میزبان – میهمان انجام شد. شکل ۲ نمودار مربوط به جفت مولکولهای DPhCzT و DPhBdT و More و همچنین سایر مولکولهای مورد مطالعه را نشان می دهد. با کمینه کردن تابع هدف در رابطه (۲) مقادیر پارامتر محدوده مجزا بهینه شده در محدوده ۲۰۰۶ تا ۰/۳۰ (بر حسب ¹-Bohr) برای تمام سیستمهای مورد مطالعه به دست آمد. از این مقادیر برای طراحی تابعیهای هیبریدی محدوده مجزا با تنظیم بهینه جهت توصیف فرآیند شکافت ناهمسان فسفرسانس دمای اتاق بر اساس برقراری رابطه (۱) استفاده شد و بررسیهای آماری در برابر دادههای مرجع تجربی با استفاده از معیار جذر میانگین مربع انحرافات (RMSD) صورت گرفت (شکل ۳). بر اساس نتایچ، تابعیهای مبتنی بر BE و ترکیبهای 0.0 =م، 0.1 $= \beta$ و 0.00 =م، 0.00 $= \beta$ با کمترین انحرافات نسبت به دادههای تجربی (روشهای ستارهدار در شکل ۳) را میتوان به عنوان روشهای قابل اطمینان و مقرون به صرفه برای توصیف فرآیند شکافت ناهمسان فسفرسانس دمای اتاق توصیه کرد.



شکل ۲ : نمودارهای تابع هدف J^2 بر حسب پارامتر محدوده مجزا برای تمام مولکولهای مورد مطالعه. نمودارها به ترتیب از چپ به راست مربوط به PBE با ترکیبهای lpha=0.0 , $m{lpha}=1.0$ و 0.10 $= m{lpha}$, 0.90 $m{eta}=0.90$ میباشند.



شکل ۳ : نمودارهای رنگی دادههای آماری RMSD تابعیهای هیبریدی محدوده مجزا با تنظیم بهینه براساس نوار رنگی سمت برای فر آیند شکافت ناهمسان فسفرسانس دمای اتاق.

۴- نتیجهگیری

در طی این تحقیق، چندین نوع از تابعیهای هیبریدی محدوده مجزا با تنظیم بهینه که فرآیند شکافت ناهمسان فسفرسانس دمای اتاق را با صحت بالا و به شکل قابل اعتمادی توصیف میکنند، طراحی شد. در مقایسه با مدلهای استاندارد با پارامترهای پیشفرض و همچنین سایر تقریبهای محدوده مجزا، روشهای طراحی شده توافق بهتری را با نتایج تجربی نشان میدهند.

منابع

Yan, X., Peng, H., Xiang, Y., Wang, J., Yu, L., Tao, Y., Li, H., Huang, W., & Chen, R. (2022). Recent advances on host–guest material systems toward organic room temperature phosphorescence. Small, 18(1), 2104073.
 Sun, Q., Ren, J., Peng, Q., & Shuai, Z. (2023). Heterofission mechanism for pure organic room temperature phosphorescence. Advanced Optical Materials, 12(5), 2301769.



بسپار بر پایهی بنزوکینون بهعنوان آند برای باتریهای یون لیتیوم/سدیم/پتاسیم: یک مطالعه نظری

نگین یزدخواستی^{۱، *}، اکبر امیدوار ^۲ ۱-گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان myazdan777@gmail.com ۲- گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه اصفهان ra.omidvar@chem.ui.ac.ir

واژگان کلیدی: باتری های یون فلزات قلیایی، ظرفیت ذخیره سازی، مواد آندی، نظریه تابعی چگالی

۱- مقدمه

در قرن بیستویکم میلادی با کاهش تدریجی سوختهای فسیلی و افزایش روزافزون مصرف جهانی انرژی، تلاش جهت یافتن منابع انرژی جایگزین شدت گرفته است. براین اساس، باتریها بهعنوان یکی از جایگزینهای پاک برای سوختهای فسیلی در نظر گرفته میشود. از متداولترین و در عین حال پربازدهترین نوع باتریها، میتوان به باتریهای یون لیتیوم، یون سدیم و یون پتاسیم اشاره نمود. این نوع از باتریها عملکرد قابلقبولی را در محدودههای دمایی مختلف از خود نشان دادهاند[۱]. تحقیق و بوسعه در بهبود عملکرد پر و خالیشدن یک باتری از موارد موردتوجه محققین و صنایع میباشد. در این پژوهش، بر بخش آندی باتریهای یون لیتیوم، یون سدیم و یون پتاسیم پرداخته میشود. هدف این پژوهش طراحی محاسباتی مادهی آندی بر پایهی بسپار ۵۰۲-دی هیدروکسی-۴۰۱-بنزوکینون-۶۰۶-متیلن قابل استفاده در باتریهای یون لیتیوم، یون سدیم و یون پتاسیم می-باتریهای یون لیتیوم، یون سدیم و یون پتاسیم پرداخته میشود. هدف این پژوهش طراحی محاسباتی مادهی آندی بر پایهی بسپار ۵۰۲-دی هیدروکسی-۴۰۱-بنزوکینون-۶۰۶-متیلن قابل استفاده در باتریهای یون لیتیوم، یون سدیم و یون پتاسیم می-باتریهای یون لیتیوم، یون سدیم و یون پتاسیم پرداخته میشود. هدف این پژوهش طراحی محاسباتی ماده ری باندی بر پایهی بسپار ۵۰۵-دی هیدروکسی-۴۰۱-بنزوکینون-۶۰۶-متیلن قابل استفاده در باتریهای یون لیتیوم، یون سدیم و یون پتاسیم می-تخریب در دماهای بالا مقاوم می سازد. این خاصیت میتوان نقطهی قوت این ماده جهت استفاده در باتریها در نظر گرفته شود. همچنین، این بسپار در برابر طیف وسیعی از مواد شیمیایی از جمله اسیدها، بازها و حلال ها مقاوم است و هدایت تخریب در دماهای بالا مقاوم می سازد. این خاصیت میتواند نقطهی قوت این ماده جهت استفاده در باتری هدایت تخریب در دماهای باین می بر در برابر طیف وسیعی از مواد شیمیایی از جمله اسیدها، بازها و حلال ها مقاوم است و هدایت در شیمی سبز مورد توجه قرارگیرد و از آنجایی که اشتعال پذیری کمی دارد، خطرات ناشی از اشتعال در دماهای بالا را به در شیمی سبز مورد توجه قرارگیرد و از آنجایی که اشتعال پذیری کمی دارد، خطرات ناشی از اشتعال در دماهای بالا را به

۲- روش

در این پژوهش از روش نظریه تابعی چگالی (Density Functional Theory) استفاده شدهاست. بر این اساس تابعی b3lyp با مجموعه پایه (b-31g(d) جهت بهینهسازی ساختاری استفاده شدهاست. همچنین کلیه محاسبات با استفاده از نرم افزار گوسین (GAUSSIAN09) انجام شده است. ساختارهای بهینهشده بسپار قبل و بعد از جذب یون های لیتیوم، سدیم و پتاسیم مورد بررسی در این پژوهش به ترتیب در شکل (۱) قابل مشاهده هستند. دانسکاه اصفیان ۲۹ و ۲۰ آبان ۱۴۰۳

۳- بحث و نتیجهگیری

در این پژوهش عملکرد بسیار ۵،۲–دی هیدروکسی-۴،۱–بنزوکینون-۶،۲–متیلن به عنوان ماده ی آندی در باتری یون لیتیم، سدیم و پتاسیم مورد بررسی قرارگرفت. با توجه به نتایج بدست آمده در جدول ۳.۲۰۱ محاسبات شکاف انرژی بسپار و مقادیر انرژی جذب به ترتیب برای یونهای لیتیوم، سدیم و پتاسیم گزارش شدهاست. شکاف انرژی بسپار قبل از جذب یونها برابر با ۲.۶۵ الکترون ولت بدست آمد، که حاکی از رفتار نیمه هادی آن دارد. در حالی که با افزایش تعداد یونهای جذب شده مقادیر شکاف انرژی کاهش یافته و بسپار خصلت فلزی نشان میدهد. همچنین، وجود مقادیر انرژی جذب منفی نشان میدهد که جذب یونها در محلهای جذبی مختلف در بسپار، از نظر انرژی و ترمودینامیکی مطلوب است. ظرفیت ذخیرهی بالای یون لیتیم، سدیم و پتاسیم بر روی آند که به عنوان پارامتری مهم در عملکرد مناسب هر مادهی آندی در باتری در نظر گرفته می شود، بررسی شد که ساختار بسپار با ظرفیت ذخیره یون لیتیوم برابر با ۶۴۱.۹۱ میلی آمپر ساعت بر گرم، عملکرد بهتری در مقایسه با بسپار با ظرفیت ذخیره یون سدیم و پتاسیم ۵۳۴.۹۳ میلی آمپر ساعت بر گرم نشان داد. همچنین، همانطور که در شکل ۱ هم مشاهده می شود، از میان محل های جذبی مختلف جهت جذب یون لیتیم، سدیم و پتاسیم موقعیت جذبی در اطراف اتم های اکسیژن، پایدارترین محل جذب را نشان میدهد.

جدول ۱ : شکاف اترژی (۲۰۰۱) ، اترژی جذب (Eads) ، برای پلیمر مورد مطالعه قبل و بعد از جذب یون لیتیوم		جدول ۲ : شکاف انرژی (EHL) ، انرژی جذب (Eads) ، برای پلیمر مورد مطالعه قبل و بعد از جذب یون سدیم			بدول ۳ : شکاف انرژی (E _{H-l}) ، انرژی جذب (E _{ads}) ، برای پلیمر مورد مطالعه قبل و بعد از جذب یون یتاسیم			
Number of Li- ion	E _{H-L} (eV)	Eads (eV)	Number of Na- ion	E _{H-L} (eV)	Eads (eV)	Number of Na- ion	E _{H-L} (eV)	Eads (eV)
polymer	2.65		polymer	2.65	_	Polymer	2.65	
Li	0.86	-1.68	Na	0.32	-2.26	K	0.83	-3.33
2Li	0.58	-2.20	2Na	0.27	-1.56	2K	0.46	-2.50
3Li	0.92	-2.02	3Na	0.40	-2.09	3K	0.23	-2.65
4Li	0.84	-1.83	4Na	0.78	-1.96	4K	0.40	-2.44
5Li	1.22	-2.14	5Na	0.31	-2.19	5K	1.22	-2.50
6Li	0.31	-1.95	6Na	0.34	-2.40	6K	0.31	-2.26
7Li	1.70	-2.53	7Na	0.85	-2.46	7K	0.67	-2.35
8Li	1.33	-3.02	8Na	2.46	-2.29	8K	0.47	-2.21
9Li	2.33	-3.14	9Na	0.88	-2.25	9K	0.73	-2.10
10Li	2.01	-3.02	10Na	1.31	-2.24	10K	1.21	-2.16
11Li	0.86	-2.92	11Na	0.91	-2.08	11K	0.80	-2.02
12Li	0.42	-2.68	12Na	0.33	-2.01	12K	0.59	-1.89
13Li	0.31	-2.65	13Na	0.99	-1.90	13K	0.99	-1.86
14Li	0.25	-2.46	14Na	0.34	-1.80	14K	0.20	-1.75
15Li	0.81	-2.41	15Na	0.56	-1.72	15K	0.69	-1.70
16Li	0.36	-2.30	<u>.</u>					
17Li	1.06	-2.31						
18Li	0.19	-2.23						



18Li

0.19

شكل۱ : الف) ساختار بهينه شده بسيار قبل از جذب يون ب) ساختار بهينه شده بسيار بعد از جذب ۱۸ يون ليتيوم، ج)۱۵ يون سديم، د)١۵ يون پتاسيم



منابع و مراجع

[1] Omidvar, A. (**2020**). Defective carbon nanocone as an anode material for lithium-ion batteries. *ACS Applied Energy Materials*, *3*(11), 11463-1146

[2] Le Gall, T., Reiman, K. H., Grossel, M. C., & Owen, J. R. (**2003**). Poly (2, 5-dihydroxy-1, 4-benzoquinone-3, 6-methylene): a new organic polymer as positive electrode material for rechargeable lithium batteries. *Journal of power sources*, *119*, 316-320.



مقایسه دو مایع یونی زیستی: ساختار، دینامیک و برهم کنش

پرنیان یوسفی'*، فاطمه موسوی'، محسن عباسپور "

۱ - دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد (parnianyousefi@yahoo.com) ۲- دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد (moosavibaigi@um.ac.ir) ۳- استاد، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه حکیم سبزواری (m.abbaspour@hsu.ac.ir)

واژگان كليدى: مايع يونى زيستى، برهمكنش غيركووالانسى، گراديان چگالى كاهش يافته، پيوند هيدروژنى، ديناميك

۱–مقدمه

انواع مایع یونی زیست سازگار (مایع یونی زیستی) در مقایسه با مایعات یونی رایج از ویژگیهای منحصربه فرد زیست تخریب پذیری بالا، سمیت کم، در دسترس بودن، هزینه تولید پایین و پایداری گرمایی بالا برخوردار هستند^۱. این مایعات یونی اغلب از یونهای مشتق شده از مواد زیستی مانند آمونیوم، کولین، آمینواسید و گوانیدینیوم تهیه می شوند. مایعات یونی زیستی کاربردهای مختلفی از جمله نقش حلال در سنتز داروها و پیش تصفیه زیست تودهها دارند^۲. در مطالعه ی حاضر، تمرکز بر دو مایع یونی حاوی کاتیون آمونیوم/کولین و آنیون آمینواسیدی گلایسینات (AMOGLY و CHOGLY) می باشد. نکته قابل تأکید در این دو مایع یونی زیستی وجود کاتیون و آنیونی در ساختار است که نقش حیاتی در فرایندهای متابولیک داشته و غیرسمی است.

۲- جزئیات شبیهسازی

در مطالعه یحاضر، محاسبات مکانیک کوانتومی با نظریه تابعی چگالی و شبیه سازی دینامیک مولکولی به کار برده شده تا ویژگی های ساختاری شامل چگونگی ارتباط و برهم کنش کاتیون و آنیون در دو دیدگاه اتمی و الکترونی، چگالی الکترونی و B3LYP/6 جرمی و دینامیک سیستم بررسی شوند. محاسبات کوانتومی با استفاده از نرمافزار گوسین ۹۰ در سطح نظری -B3LYP/6 (d,p) (d,p) (D) ++11 با گنجاندن پراکندگی الکترونی انجام شدند. پس از بهینه سازی ساختار الکترونی و تعیین جهتگیری دقیق آنیون و کاتیون نو کاتیون نسبت به یکدیگر و اطمینان از وجود ساختار در حالت پایه یالکترونی (عدم وجود فرکانس موهومی)، بارهای آنیون و کاتیون نسبت به یکدیگر و اطمینان از وجود ساختار در حالت پایه یالکترونی (عدم وجود فرکانس موهومی)، بارهای جزئی اتمی با کمک روش NBO محاسبه شدند. جهت بررسی بیشتر و دقیق تر نتایج این بخش از نرمافزارهای گوس ویو نسخه ۶ و کاتیون نسبت به یکدیگر و اطمینان از وجود ساختار در حالت پایه یالکترونی (عدم وجود فرکانس موهومی)، بارهای جزئی اتمی با کمک روش NBO محاسبه شدند. جهت بررسی بیشتر و دقیق تر نتایج این بخش از نرمافزارهای گوس ویو نسخه ۶ و ماکتولی انجام شدند. جهت بررسی میشتر و دقیق تر نتایج این بخش از نرمافزارهای گوس ویو نسخه و دوکلی ایمون و یا اسخار اولیه در شایه گرفت. شیه سازی دینامیک مولکولی انجام شده با استفاده از نرمافزار گرومکس نسخه ۲۰۲۰⁴ مورد استفاده قرار گرفت. شبیه سازی با ایجاد سل اولیه شروع و با فرایندهای کمینه سازی انرژی سامانه طی ۲۰۰۰۵ مرحله، تعادل NVT در دمای XNT طی در مای XNT طی در مای XNT طی و فرا، در ۱۰۰۵ و جمعآوری دادههای شبیه سازی در دمای XNT و فی ایون در دمای ترای در همان دما و فشار معا در می در مای و فشار محا در مان یا مرده می مرحله، تعادل NVT در دمای XNT و فی در ما یا برای می در ما و فی در دمای XNT و معانی در دمای XNT و در مای در در ما در در داده یا در در همان دما و فشار مان در ما یا می در می XNT و معان در در می XNT و در دا یا رون در دره یا در در مای XNT و در دا یا رون در در می XNT و معا در در دامی XNT و معا در در دامه و فی در در می XNT و در دا یا را ثابت جفت شدگی ۲۱۰۱۰ و با را روس در در می XNT و در دا یا را را ثابت جوت شدگی کر کرا یا می در دان یا ترم در در این کر در دان و معا در و دا را با یا در در دان یا که در دا و نوا در درم یا کا و در دا

ساختاری و انتقالی نظیر تابع توزیع شعاعی، تعداد پیوند هیدروژنی بین اجزا و ضریب نفوذ محاسبه و مورد تحلیل و بررسی قرار گرفتند. میدان نیروی OPLS-AA[°] برای توصیف مایع یونی با شعاع قطع Å ۲/۵ در برهم کنشهای کوتاهبرد و روش PME برای برهم کنش بلندبرد مورد استفاده قرار گرفتند.

۳- بحث و نتیجهگیری

نتایج محاسبات کوانتومی نشان می دهند مقدار شکاف انرژی (اختلاف انرژی بین بالاترین اوربیتال مولکولی پرشده و پایین ترین اوربیتال مولکولی پرنشده) در مایع یونی CHOGLY (eV CHOGLY) بیشتر از AMOGLY (eV AMOGLY) است. مقدار شکاف انرژی بیشتر معیاری از برهم کنش اوربیتالی قوی تر^۱ و درنتیجه پایداری بیشتر مایع یونی CHOGLY مرابر با CHOGLY) انرژی برهم کنش بین کاتیون و آنیون (در مایع یونی CHOGLY برابر با OMS/۶۱۰ kJ/mol و قرادیان چگالی کاهش میافته (F80/۱۵۰ در نیز این نتیجه آن را تأیید می کند. تجزیه و تحلیل برهم کنش غیر کووالانسی (NCI) و گرادیان چگالی کاهش یافته (RDG) در شکل ۱ نشان می دهد پیوند هیدروژنی قوی در CHOGLY ناشی از برهم کنش پیوند هیدروژنی بین HO کاتیون و گروه شکل ۱ نشان می دهد پیوند هیدروژنی قوی در CHOGLY ناشی از برهم کنش پیوند هیدروژنی بین HO کاتیون و گروه مربوکسیلات آنیون می باشد. مقایسه میانگین مجذور جابه جایی (MSD) این دو مایع یونی نشان می دهد MSD آنیون و کاتیون است. جالب توجه است که چگالی AMOGLY (ست؛ بنابراین، تحرک کاتیون و آنیون در CHOGLY به دلیل برهم کنش بیشتر، کمتر این نتایج در کنار تغییر تعداد پیوند هیدروژنی بین آنیون و کاتیون و آنیون در CHOGLY به دلیل برهم کنش بیشتر است. زیستی است. به طور کلی، نتایج حاصل از بررسی تابع توزیع شعاعی، پیوند هیدروژنی و فرز می می دو مایع یونی زیست تخریب پذیر CHOGLY (ته کارتی بین آنیون و کاتیون (شکل ۲) در توافق با نگاه کوانتومی به این دو مایع یونی زیست تخریب پذیر CHOGLY رفتار متفاوتی را در مقایسه با AMOGLY (ته می کان می دهد. می یونی یونی یونی زیست تخریب پذیر CHOGLy رفتار متفاوتی را در مقایسه با AMOGLY (ته فره مایع یونی یونی بونی بین رو مایع یونی و زیستن می دهد. پیونی می در مایع یونی در CHOGL (تومی به این دو مایع یونی این نتایج در کنار تغییر تعداد پیوند هیدروژنی بین آنیون و کاتیون (شکل ۲) در توافق با نگاه کوانتومی به این دو مایع یونی زیست تخریب پذیر CHOGLY و دو زیر می تابع توزیع شعاعی، پیوند هیدروژنی و ضریب نفوذ نشان می دهند مایع یونی زیست تخریب پذیر در تیجه رفتار متفاوتی را در مقایسه با AMOGLY در مایع زیست در مایع رونی در و مایع یونی در و آنیون، تحرک کمتر و چگالی بیشتر از جمله این رفتارهای متفاوت است. بابراین، تغییر ساختار بسیار کم در مایع یونی بر خواص ساختاری در دارد.



شکل ۲: تغییر تعداد پیوند هیدروژنی بین کاتیون و آنیون با زمان شبیهسازی در دمای K ۳۰۰ و فشار ۱ bar


شکل ۱: همسطح و نموداهای پراکندگی RDG برای (الف) CHOGLY و (ب)

منابع و مراجع

[1] M. Moosavi, N. Banazadeh & M. Torkzadeh, (2019), Structure and dynamics in amino acid choline-based ionic liquids: a combined QTAIM, NCI, DFT, and molecular dynamics study, The Journal of Physical Chemistry B 123(18), 4070-4084.

[2] X. Chen, R. Hao, W. Chen, H. Jia, S. Qin, Q. Wang, D. Zhang, Z. Han & Y. Li, (**2024**), Effect of choline amino acid ionic liquids on maize seed germination and endogenous plant hormone levels, RSC advances 14(1), 382-389.

[3] M. Frisch, G. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci & G. Petersson, (2009), gaussian 09, Gaussian, Inc., Wallingford CT 121, 150-166.

[4] T. Lu & F. Chen, (2012), Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer, Journal of computational chemistry 33(5), 580-592.

[5] M. J. Abraham, T. Murtola, R. Schulz, S. Páll, J. C. Smith, B. Hess & E. Lindahl, (**2015**), GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers, SoftwareX 1, 19-25.

[6] B. Doherty & O. Acevedo, (2018), OPLS force field for choline chloride-based deep eutectic solvents, The Journal of Physical Chemistry B 122(43), 9982-9993.

نقش نانوصفحههای گرافن اکسید در تشکیل هیدراتهای گازی متان

دانگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

پرنیان یوسفی^۱*، محسن عباسپور^۲*، فاطمه موسوی^۳

۱ -دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد (parnianyousefi@yahoo.com) ۲- استاد، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه حکیم سبزواری (m.abbaspour@hsu.ac.ir) ۳- دانشیار ، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد (moosavibaigi@um.ac.ir)

واژگان کلیدی: شبیهسازی دینامیک مولکولی، هیدراتهای گازی متان، گرافن اکسید

۱– مقدمه

هیدراتهای گازی، ساختارهای جامد بلورین یخ مانندی از مولکولهای گاز (متان، اتان و کربندیاکسید) به دام افتاده بین مولکولهای آب هستند^۱. فناوری هیدراتهای گازی چشم اندازهای زیادی برای کاربرد در بسیاری از زمینهها از جمله ذخیره و انتقال گاز ^۲، جذب و جداسازی کربندیاکسید ^۲ و فناوری نمکزدایی آب دریا ^۴ نشان داده است. استفاده از هیدراتهای گازی به عنوان یک فناوری پایدار برای ذخیرهسازی و انتقال گاز، با چندین چالش از جمله میزان کم تشکیل هیدرات و قابلیت کم ذخیرهسازی گاز مواجه است. مطالعه اخیر نشان میدهد ^۵ نانوساختارهای کربنی برای فرایند تشکیل هیدرات گازی کارامد هستند. لازم به ذکر است، فرایند تشکیل هیدرات گرمازا است و گرمای تولید شده در طی فرایند، منجر به تخریب بلورهای هیدرات میشود و بر رشد هیدرات تأثیر منفی میگذارد. بنابراین، این محرکهای تشکیل هیدرات با رسانش گرمایی زیاد میتوانند گرما را از سیستم حذف کرده، دمای سیستم را پایین نگه داشته و هیدرات را پایدارتر نمایند. علاوه براین، نانوساختارهای کربنی به دلیل سطح ویژهی زیاد، جایگاههای فعال تری برای هستهزایی فراهم میکنند. در این میان، گرافن اکسید به دلیل وجود گروههای عاملی حاوی اکسیژن میتواند پراکندگی قابل قبول در آب ایجاد کند و موجب افزایش تشکیل هیدرات گازی شود.

۲- جزئیات شبیه سازی

تشکیل هیدراتهای گازی متان بین صفحههای مختلف گرافن، C₈O-مسطح، C₈O-خمیده و C₈OP) با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار میگیرد (شکل۱). مولکولهای آب و متان بین دو صفحه صلب و موازی به فاصله Å متوزیع و همه سیستمها در دمای ۱۰۰۰ کلوین متعادل شدند. سپس، سیستمها تحت سیکلهای گرمایش و سرمایش از دمای ۸ Å توزیع و همه سیستمها در دمای ۵۰۰۰ کلوین متعادل شدند. سپس، سیستمها تحت سیکلهای گرمایش و سرمایش از دمای ۲۳۰ تا ۸ ۵ ترزیع و همه سیستمها در دمای ۵۰۰۰ کلوین متعادل شدند. سپس، سیستمها تحت سیکلهای گرمایش و سرمایش از دمای ۸ Å توزیع و همه سیستمها در دمای ۸ ۵ قرار گرفتند. همه سیستمها به مدت ۳۰۱۶ در دمای ۲۳۰ ۲ در انسامبل NVT از دمای ۲۳۰ تا ۸ ۵ معادل و مجدد در معرض همان چرخه گرمایش و سرمایش قبل قرار گرفتند تا بلور پایدار ایجاد شود. در نهایت، شبیهسازی جمعآوری نتایج برای ۲۰۱۶ ادامه یافت. شبیهسازیهای مولکولی با نرمافزار دی لپالی کلاسیک نسخه ۱۹۰ ^۶ انجام و الگوریتم جهشی ورلت برای حل معادلات حرکت نیوتن با گام زمانی ۱۴ ۶ ۱۰ به کار گرفته شد. پارامترهای میدان نیروی صفحههای گرافن

اکسید از مطالعه تانگ و همکارانش ^۷ گرفته شد و برای مولکولهای آب و متان به ترتیب از مدل TIP5P ^۸ و مطالعه بای و همکارانش ^۹ استفاده شد.

عبان ۲۹ و ۳۰ باران ۱۴۰۳

۳- بحث و نتیجه گیری



شکل ۲: تابع توزیع شعاعی گرافن، C₈O-مسطح،C₈O-خمیده و C₈OH)2



منابع و مراجع

[1] Y. Lin, Y. Hao, Q. Shi, Y. Xu, Z. Song, Z. Zhou, Y. Fu, Z. Zhang & J. Wu, (**2024**), Enhanced formation of methane hydrates via graphene oxide: Machine learning insights from molecular dynamics simulations, Energy 289, 130080.

[2] S.-D. Zhou, Y.-Y. Xiao, C.-Q. Xia, G.-X. Liu, X.-Y. Li, X.-Y. Ni, Y. Liu & X.-F. Lv, (**2023**), Enhanced the formation kinetics of CO₂ hydrate using graphene oxide and L-methionine, Journal of Cleaner Production 433, 139864.

[3] J. Bian, H. Wang, K. Yang, J. Chen & X. Cao, (**2022**), Spatial differences in pressure and heat transfer characteristics of CO₂ hydrate with dissociation for geological CO₂ storage, Energy 240, 122508.

[4] O. Bamaga, I. Ahmed, A. M. Wafiyah, M. Albeirutty, H. Abulkhair, A. Shaiban & P. Linga, (2022), Studies on methane gas hydrate formation kinetics enhanced by isopentane and sodium dodecyl sulfate promoters for seawater desalination, Energies 15(24), 9652.

[5] E. Rezaei, M. Manteghian & M. Tamaddondar, (**2016**), Kinetic study of ethylene hydrate formation in presence of graphene oxide and sodium dodecyl sulfate, Journal of Petroleum Science and Engineering 147, 857-863.

[6] W. Smith, C. Yong & P. Rodger, (2002), DL_POLY: Application to molecular simulation, Molecular Simulation 28(5), 385-471.

[7] H. Tang, D. Liu, Y. Zhao, X. Yang, J. Lu & F. Cui, (**2015**), Molecular dynamics study of the aggregation process of graphene oxide in water, The Journal of Physical Chemistry C 119(47), 26712-26718.

[8] M. Lısal, J. Kolafa & I. Nezbeda, (2002), An examination of the five-site potential (TIP5P) for water, The Journal of chemical physics 117(19), 8892-8897.

[9] J. Bai & X. C. Zeng, (2012), Polymorphism and polyamorphism in bilayer water confined to slit nanopore under high pressure, Proceedings of the National Academy of Sciences 109(52), 21240-21245.



مطالعه محاسباتی آئروسل آلی ثانویه ناشی از اکسیداسیون ترانس-۲-پنتنال با رادیکالکلر

مهسا يوسفيان*، مرتضى واحدپور

Mahsa.yousefian@znu.ac.ir ^{*}دانشجو، شیمی فیزیک، شیمی، علوم پایه، دانشگاه زنجان، vahed@znu.ac.ir استاد، شیمی فیزیک، شیمی، علوم پایه، دانشگاه زنجان، vahed

واژگان کلیدی: آئروسل آلی ثانویه، ترانس-۲- پنتنال، اتمسفر، انرژی نسبی، رادیکال کلر

۱– مقدمه

ترکیبات آلی بیولوژیکی فرار نقش مهمی در شیمی تروپوسفر ایفا میکنند، چرا که اکسیداسیون آنها مسیرهای واکنش را برای تشکیل آئروسلهای آلی ثانویه (SOA) فراهم میکنند. بنابراین پی بردن به اکسیداسیون این ترکیبات در جو، برای ارزیابی نقش آنها در شیمی تروپوسفر، از اهمیت ویژهای برخوردار است. [۱] بسیاری از ترکیبات فرار بیولوژیکی، دارای پیوند دوگانه کربن کربن غیراشباع هستند که این نوع پیوند به این نوع ترکیبات، قابلیت واکنش پذیری بیشتری نسبت به اکسیدانهای جوی می دهد. [۲] کلروفلوئوروکربن (CFC) موادی شیمیایی هستند که در تهویه و در چرخههای انتقال حرارت به عنوان مادهی واسط کاربرد وسیعی دارند. از کلروفلوئورکربنها بهعنوان گاز یخچال نیز استفاده می شود. این مواد باعث نابودی لایهی اوزون نیز شدهاند. نور خورشید باعث شکسته شدن این ماده می شود و اتم های کلر ازاد می شوند. اتم کلر بسیار فعال و پرانرژی است و می تواند با اکسیژن حاصل از تجزیهی اوزون واکنش بدهد و باعث تخریب اوزون بشود. [۳]

۲- روش

در این کار، جزییات سازوکار واکنش T2P با رادیکال کلر مورد بحث و بررسی قرار گرفته است. ساختار تمام گونههای درگیر در این واکنش با روش محاسباتی M06-2X با مجموعه پایه G (2df,2p) + G -311 + G بهینه شدهاند. همه این محاسبات توسط نرمافزار گوسین ۱۶ انجام شده است.

۳- بحث و نتیجه گیری

در مرحله اول، پیش واکنش CR توسط حالت گذار TS1 با عبور از سد انرژی ۰٬۰۰۰۲ کیلوکالری بر مول به کمپلکس محصول CP1 تبدیل می شود. TS1 یک فرکانس موهومی در (۲۵۰ ۲۹۸ دارد. در مرحله آخر CP1 بدون عبور از حالت گذاری با CP1 تبدیل می شود. TS1 یک فرکانس موهومی در (۲۵۰۰ محصول نهایی (CP1 + HCl) دارد. در مرحله آخر OCHCHCHCH2CH2 با تولید خواهد شد. در مرحله دوم، پیش واکنش CP تولیط حالت گذار TS2 با عبور از سد انرژی ۰/۰۶۷۹ کیلوکالری بر مول به کمپلکس محصول مرحله در مرحله آخر OCHCHCHCH2CH2 با تولید خواهد شد. در مرحله دوم، پیش واکنش CP تولیط حالت گذار TS2 با عبور از سد انرژی ۰/۰۶۷۹ کیلوکالری بر مول به کمپلکس محصول مرحله دوم، پیش واکنش CP

CP2 تبدیل میشود. TS2 یک فرکانس موهومی در (^۱-۵۸ مارد. در مرحله آخر CP2 بدون عبور از حالتگذاری با شکسته شدن یک پیوند کووالانسی بین SC-8C، محصول نهایی (OCHCHCH + CICH2CH3) P2 تولید خواهد شد. شکل تمامی گونههای درگیر در شکل ۱ و انرژی کل و انرژی نسبی با روش M06-2X در جدول ۱ فهرست شده⊣ند.

14.7.111.77.979



شکل ۱ : نمودار انرژی پتانسیل واکنش T2P + Cl در سطح (2df,2p) M06-2X/6-311

گونەھا	M06-2X
T2P + C1	-42.4222 (./)
CR	-72.10208 (1.22)
CP1	-72.10248 (1.22)
CP2	-72•/4992 (•/2295)
TS1	-42.4228 (/
TS2	-72.16911 (./.262)
OCHCHCHCH2CH2 + HCl	-72.10207 (1.26)
OCHCHCH + ClCH ₂ CH ₃	-72./6986 (./.201)

T2P + 0	کنش Cl	برای وا	گونهها	ا تمامی	نسبی)	(انرژی	کل و	: انرژی	جدول ۱
---------	--------	---------	--------	---------	-------	--------	------	---------	--------

در واکنش T2P + Cl دو محصول P1 و P2 به دست آمده است که با توجه به انرژی نسبی، محصول P1 پایداری بیشتری را دارد.



۴- منابع و مراجع

- [1] Hoffmann, T., Odum, J.R., Bowman, F., Collins, D., Klockow, D., (1997). Formation of organic aerosols from
- the oxidation of biogenic hydrocarbons. Atmospheric Chemistry, 26 (2), 189-222.
- [2] Atkinson, R., Arey, J., (2003). Atmos. Environ. 37, S197-S219.
- [3] Weikang, X,Simei, S., (**2022**). Theoretical study on the formation of Criegee intermediates from ozonolysis of pentenal: An example of trans-2-pentenal.Chemosphere,303, 135142.



فر آیندهای برخورد، پارامترهای دینامیکی، وابستگی دمایی مقادیر برخورد واکنش CN+H2 بر روی سطح انرژی پتانسیل درونیابی شده

فائزه يونسى^۱، شاپور رمضانی^۲

۱. دانشجو دکتری، شیمیفیزیک، علوم پایه، دانشکده شیمی، دانشگاه یاسوج f.younesi7773@gmail.com ۲. دانشیار، شیمیفیزیک، علوم پایه، دانشکده شیمی، دانشگاه یاسوج gmail.com

كليد واژه: مكانيسم، ديناميك واكنش، سطح انرژى پتانسيل، سطح مقطع واكنش، اثر ايزوتوپي

۱– مقدمه:

سینتیک شیمیایی علم مطالعه سیستمهای ناظر بر تجزیه شیمیایی و یا تغییر حالت مولکولها است. سینتیک شیمیایی یکی از قلمروهای جالب توجه شیمیفیزیک است. امروزه قسمت قابل توجهی از پژوهشهای شیمی نظری در ارتباط با شناخت چگونگی انجام واکنشهای شیمیایی و میزان سرعت و عوامل موثر بر آن است.

۲- روش:

در این پژوهش به مطالعه دینامیک کلاسیکی واکنش CN+H₂ و کاربرد روش درونیابی اصلاح شده شپارد برای تعیین سطح انرژی پتانسیل میباشد. تعیین سطح انرژی پتانسیل سیستمهای چهار اتمی، به دلیل نیاز به تعداد زیاد مختصات و عدم وجود تابعی شبیه به تابع مورس، امکانپذیر نمیباشد. کولینز روش اوربیتال مولکولی آغارین در تعدادی ساختار مولکولی مجزا را انجام داده است. مطابق با این روش سطح انرژی پتانسیل میتواند به صورت سری تیلور نوشته شود. واکنش موردنظر یکی از واکنشهای مورد توجه در شیمی نیتروژن در فرآیندهای احتراقی میباشد.[1]

۳- بحث:

در این پژوهش فرایند برخورد رادیکال CN با مولکول هیدروژن و ایزوتوپهای مربوطه آن به کمک سطح انرژی پتانسیل مورد بررسی قرار گرفت. احتمال انجام واکنش، سطح مقطع و ثابت سرعت مربوط به این واکنشها تعیین شد. در مسیرهای غیرواکنش پذیر، به منظور محاسبه زاویه پراکندگی برخوردهای کشسان بررسی شد. [2] همچنین به منظور تعیین انرژی تبدیل شده یا مبادله شده بین واکنش دهندهها تفاوت انرژی بین حالات ابتدایی و انتهایی مورد مطالعه قرار گرفت. برای همه مسیرها، تاثیر پارامتر برخورد و انرژی انتقالی ذرات بر روی احتمال واکنش، انرژی منتقل شده و زاویه پراکندگی بررسی شد. و در پایان به منظور بررسی اثر جرم بر روی کمیت و کیفیت محصولات و همین طور احتمال واکنش و دیگر مشاهده پذیرهای فیزیکی، اثر ایزوتوپی مورد مطالعه قرار گرفت.[3,4]





منابع

[1] Collins M.A, (2002), Molecular potential-energy surfaces for chemical reaction dynamics, Theor. Chem. Acc. 108-313, Australian National University, Canberra.

[2] Ramazani. S, Frankcombe T.J, Collins M.A, (2009) J. Chem. Phys, 130, Australian National University, Canberra.

[3] Sharafdini R., Ramazani S, (2020) Chemistry Select. 5-3518, Iran, Yasouj university.
[4] Padash R, Ramazani S, (2020) Mol. Astrophys. 20-100085, Iran, Yasouj University.



دانشگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ آبان ۱۴۰۳

4

م فنركه

.11/1-

صفحه	نویسنده	شماره	نویسنده صفحه		شماره
)))	باقرى اشكان	٣٢	۷۵	أبكون فاطمه	١
114.117.478.474	باقرى ستوده	٣٣	497	آهنگر حسين	۲
449	باقری نرگس	34	114	اباذرى محسن	٣
17.	بختياري اكبر	۳۵	٨٢	ابراهیمزاده چاری فاطمه	۴
47.	بديعي عليرضا	۳۶	٧٧	ابراهيم نجفآبادي مائده	۵
١٧٨	بردبار عبدالخالق	۳۷	٨٧،١٣٢،٢١٢	ابراهیمی علی	۶
۱۲۳	برقى جهرمى هانيه	۳۸	246.171124		
178.101	برومند سمانه	۳٩	۵۲۰		
474	بشیری حدیث	۴.	71.755.759	ابراهيمى نوسيبه	٧
١٢٩	بلوچ امير	41	272.027		
١٣٢	بلوچ هانيه	47	140.148	احسانی علی	٨
۴۷	بنویدی علی	۴۳	۱۰،۸۴	استادشريف معمار زهرا	٩
۱۳۵	بنىجمالى فاطمه سادات	44	۲۷۸	استاوروس واسيليوس	١٠
202	بهجتمنش اردكاني رضا	۴۵	٨٧	اسلامپناه بهنوش	11
448	بهرامی آیدین	45	٩٠	اسماعیلی علی	17
١٨٢	بهشتيان جواد	۴۷	98.302	اسمعیلی زکیه	١٣
١٣٧	بهشتي مارناني مريم	۴۸	۲۳۱	اشتری سحر	14
311,489,013	بیگلری زینب	49	۳۵۸	اشترى دليوند مونا	۱۵
180.218	نسترن پارسافرد	۵۰	٩٩	اصفهانى منصوره	18
774	پاکروش آرش	۵١	١٣	اعظمى سيدمحمد	١٧
771.777.6.1.447	پاکزادیان آتنا	۵۲	141.601	افتاده محسن	١٨
542			١٩	افيونى محمدرضا	۱۹
14.	پرويز فاطمه	۵۳	18	اقتدارى حنانه السادات	۲۰
147	پسندیدہ ندامانی محمد	۵۴	1.7	اكبرپور عاطفه	21
24	پوراسترآبادی صدیقه	۵۵	۳۹۰	اكتفا فاطمه	22
۳۰۷	پوراعتدال حميدرضا	۵۶	۱۰۵	امیدعلی فائزہ	۲۳
488	پورروستائی اردکانی فاطمه	۵۷	۳۰۵،۳۹۳،۵۴۹	اميدوار اكبر	74
140.141	پورهادی نجفآبادی سعیده	۵٨	46.174.277	امیدیان رضا	۲۵
101	پولادرگ سحر	۵۹	295,474		
١٢٩	پیروی محمدحسن	۶.	١٠٨	امیرسرداری درجز فاطمه	78
104	تابنده زهرا	۶۱	497	انبارکی مہین	۲۷
<i>۶۶</i>	ترابى سيدمحمد	87	۳٩۶	اندیشه سعید	۲۸
104	ترابی مرتضی	۶۳	۲۳۶	ايرانمنش زهرا	۲۹
480	ترابى ميرزائي نعيمه	54	14.110.4.4	ايلوخاني حسين	۳۰
99,777	توانگر زهرا	۶۵	ፖለሞ	بابکنژاد نسیم	۳۱

داسگاه اصفهان ۲۹ و ۳۰ پان ۱۴۰۳

مي فنركا

-11/1-

 14.110.4.4	خانلرزاده خاطره	١٠٢	۴۳۰	توحيدىفر ليلا	66
478	خسروى زرندى فاطمه	۱۰۳	18.	تهذيبي حانيه	۶۷
198	خليلى فاطمه	1.4	188	تيمورزاده سولماز	۶٨
117	خواجه نظامي زهرا	۱۰۵	180	جانبازفوتمي مينا	۶٩
221	خورشیدی مهرشاد	1.8	188.182	جبارى اعظم	٧٠
777	خوشنويسزاده رابعه	١٠٧	188.182	جباري مرتضي	۲١
١٣	خیرمند مهدی	۱۰۸	۱۷۵	جعفرى زينب	۲۲
۳۱۹	دژم احمدرضا	١٠٩	١٧٨	جعفريان فرانك	۷٣
490	دشتى محمدعلى	۱۱۰	۲۳	جليلي اميرحسين	۷۴
774	دلسوز هفشجانى سپيده	111	221.222.401	جليلى سيفاله	۷۵
۲۳۰	دلشاد يسرا	117	442.042		
۲۳۳	دلفان نسرين	۱۱۳	409	جليليان جعفر	٧۶
۳.۷	دمیری سجاد	114	26.6.198	جمشیدی زهرا	Y٧
222	دولتمندچهارسوقه خليلالله	110	۳۳۱،۳۳۷		
۳۱۰	دوويت آنه	118	۵۰۶،۵۰۹	جوهری شیوا	Y٨
59.222	دهستانی مریم	117	١٨١	جهانآبادی سارا	٧٩
۲۳۸	دهشیری محمدمهدی	١١٨	۲۷	چاووش پور نطنزی زهرا	٨٠
74.	دهقانی مهتاب	١١٩	184	چگینی رومینا	٨١
747	دهناری الهه	17.	30.780	حامدموسويان محمدتقي	٨٢
749	دهواری ماریه	171	١٨٧،١٩٠	حسنزاده تازه قشلاق زهرا	٨٣
41	دیناری محمد	177	۲،۲۱۸،۳۷۹	حسينى ميرقاسم	٨۴
۵۲۵	ذاكرحميدي محمدصادق	173	۵۱۸		
477	ذوالقدر امينرضا	174	198	حسيني بهارانچي مريم السادات	٨۵
749	رادكفترودي حسن	120	ፖለሞ	حسينى كوپائى منصورە	٨۶
124.24.272	رئیسی عادل	178	۱۹۳	حسينى واعظ سيداميرعلى	٨٧
202	رحمنآبادي رحيم	177	293	حقانى حسين	٨٨
414	رحیمی رضا	۱۲۸	480	حقانى محبوبه	٨٩
321.73	رحيمي رضوان	129	202	حق گو محمد	٩٠
471	رحيمىنژاد مهديه	۱۳۰	798	حقيقى بهزاد	٩١
222	رخيان محمدرضا	131	۵۰۳	حقيقى مرضيه	٩٢
202	رزاقنيا حامد	۱۳۲	199.7 • 7	حکمآبادی لیلا	٩٣
۳۵،۲۶۰	رزمخواه محمد	۱۳۳	۱۹۳	حكمت فرزانه	٩۴
202	رستمی زهرا	184	۲۰۵	حمدى هولاسو فرحناز	٩۵
30.780	رضاپور زهرا	۱۳۵	361.461	حورزاد محمدحسين	٩۶
47.	رضایی سبا	188	١٩	حیدری عباس	٩٧
409	رضایی قاسم	۱۳۷	۲۰۷٬۲۰۹	حیدری مینا	٩٨
783	رضائيان لادن	۱۳۸	۴۳۸	حيدري دوكوهكي مريم	٩٩
١٣٧	رضايىسادات مرتضى	١٣٩	T 1 T	خاکسفیدی مونا	۱۰۰
 111.7.9.7.9	رضایی صامتی مه <mark>د</mark> ی	14.	717	خانامیری حنانه	1 • 1

دانتگاه اصفهان ۲۹و ۳۰ مان ۱۴۰۳

, فنر)

.11/1

4.1	شیبانی آتنا	۱۸۰	۲۹۰٬۳۰۲	رضوىمهر مريم	141
497	شیبانی اسماعیل	۱۸۱	788.789.777	رفعتى سولماز	147
١٩	شیخی بهمن	١٨٢	۳۸	رفيعي مريم السادات	147
۳۴.	شیخی مهناز	۱۸۳	83.427.081	رمضانی شاپور	144
۷۱ <i>،</i> ۲۶۶،۲۶۹،۲۷۲	صادقی رحمت	176	۲۷۵	روشن سيما	140
۵۲۸			۲۷۸	روشن سيمين	149
747,749,749	صالحى نجفآبادي نفيسه	۱۸۵	271	ریگی اسما	141
44	صالحى اردلى محمد	۱۸۶	227	ریگی نوید	141
۵۰۳	صداقت سجاد	١٨٧	272	ریگی شایسته صفیه	149
98.801	صدیقی مینا	۱۸۸	226	زارعي حسينعلي	۱۵۰
140.141	صفری رضا	۱۸۹	۲۸۷	زمانى سيفىكار محمدرضا	101
۳۵۵	صلابت کبری	۱٩٠	44	سارسابل پيير	101
۳۵۸	صمدىشال جواد	۱۹۱	۲۹۰٬۳۰۲	ساكى فاطمه	۱۵۳
۴۷	طالبیان مهدی	197	۳۵۵	سبزيان حسن	104
743	طاهرىنيا داوود	۱۹۳	۲۹۳	سبزى سروستاني مرضيه	۱۵۵
۵۰،۳۶۱،۳۶۳،۳۶۷	ظریف مهدی	194	798,799	سخنوران وحيد	108
١٩	عابدي سعيد	۱۹۵	۱۵۱	سروری محسن	۱۵۷
۳۷۰،۳۷۳،۳۷۶	عابدي مريم	198	41	سروشمنش محسن	۱۵۸
۵۵۲،۵۵۵	عباس پور محسن	۱۹۷	۲۹۰٬۳۰۲	سلیمانی سمانه	۱۵۹
۳۷۹	عباسزاده ناصر	۱۹۸	۳۰۵	سليماني حديثه	18.
۳۸۱	عبداللهى جونقانى سلماز	۱۹۹	307,730	سليماننژاد محمد	181
ፕለፕ	عدالت مهرسا	۲۰۰	98.801	سليمانىنظر عليرضا	185
۳۸۶ ، ۳۸۸	عربپورشيراز زهرا	۲۰۱	۳۰۷	سمیعی زهرا	188
795,799	عزيزتيمورى حديثه	۲۰۲	۱۰۵	سهرابي بهشته	184
888	عزيزى پانتەآ	۲۰۳	141.604	سهرابي نسرين	180
۲۳۰	عزیزی خالد	7.4	۵۲۵	سيداحمديان سيدمسعود	188
۵،۱۰۵،۱۵۷،۱۶۰	عزيزيان سعيد	۲۰۵	۳۱۰،۳۱۳	سيدشريفي مريم	187
774	عسکری سمیه	208	877	سيفى سودابه	188
۳۹۰	علوىدانا سيدايمان	۲۰۷	۳۲۵	سیفی مینا	189
293	علويانمهر محمدمهدى	۲۰۸	227	شاد يدالله	۱۲۰
۵۴۶	علىپور مجتبى	209	479	شاملويى حميدرضا	111
180	عمرانی عبدالله	۲۱۰	۳۳۱	شاهمحمدنژاد صهيب	171
۲۰۲	غلام پور فرهاد	711	818	شبانی فاطمه	۱۷۳
18	غیاثی مینا	717	۳۲۵	شفيعي افشين	176
۵۷	فاتزى دانيله	212	218.226,669	شكوهى خديجه	۱۷۵
۳۹۳	فاضلى فاطمه	714	٣٣٧	شمس احمدسرائي محمد	178
187.895	فاطمىنسب فاطمه السادات	510	۵۷	شولر کوین	١٧٧
۴۳۳	فتاحى فاطمه	518	771.171	شهرکی آسیه	١٧٨
54.466	فخرايي سارا	717	١٢٣	شهرکی مهدی	١٧٩

دانتگاه اصفهان ۲۹و ۳۰ پان ۱۴۰۳

, فنر)

.11/1

409	محمدى باوريانى نسيم	۲۵۷	4.1	فخرى مريم	۲۱۸
47.	محمدی زیارانی قدسی	۲۵۸	757	فراهانی کبری	219
445	محمدي قشلاق ثمين	۲۵۹	4.4	فراهاني فروزي معصومه	۲۲۰
487.480.481	محمدىمنش حسين	780	4.1	فرجزاده ژيلا	221
۵۳۴	محمودى سيما	781	361	فرجيان پوريا	222
411	محمودى مهشيد	787	٧،۴١،۴۴١،۴۸۳	فرخپور حسين	۲۲۳
414	مرادپور بتول	788	۲۷،۷۷	فرضىكاهكش ناهيد	226
۴۷۷	مرادی آرزو	784	۷۵	فرمانزاده داوود	222
۶٩	مرادی بشری	260	414	فرهادی اسدالله	222
۴۸۰	مرحبائی سینا	799	98.802	فرهاديان مهرداد	222
<u>የ</u> አዋ	مردانیان دهکردی رویا	261	۲۹۰،۳۰۲	فكرى محمدحسين	222
۳۹۹	مستقر فاطمه	268	417	فلسفى نفيسه	229
114.117.478.474	مسعودى حميدرضا	789	47.	فیضی دہ نایبی مہران	۲۳۰
497	مسلمپور مصطفى	۲۷۰	۵۷	قاسمزاده شاهين	221
١٠٨	مشرقی علی	221	180	قاسمىمير شهرام	۲۳۲
۸۷،۱۳۲	مصطفوى نجمه	777	414	قدرى محمدعلى	۲۳۳
490	معصومي بالسيني هانيه	۲۷۳	۲۳	قربانى نجمه	226
498	مفتونآزاد ليلا	274	۳۵۸،۵۳۷	قلمى چوبر بهرام	۲۳۵
34.59.180.010	مقاری علی	272	۳۴.	قلىپور عليرضا	738
۵۰۳	مقدس مريم	278	۶.	کارگر کیمیا	۲۳۷
۵۰۶٬۵۰۹	منتظرظهوري مرتضي	277	474	كبوترى پروانه	۲۳۸
١٨٧	منصورى سكينه	۲۷۸	۶۳،۴۲۷	كركنى زينب	۲۳۹
۵۱۲	منصورىنسب اكبر	229	467	كريمى روحالله	74.
۵۱۵	موحدمنش سارا	۲۸۰	749	كلهر حميدرضا	241
۵۱۸	موسوى فردين	271	181.708	كمالوند محمد	242
۵۵۲٬۵۵۵	موسوى فاطمه	272	\$\$. \$ T•, \$ TT	كوثري محمدحسين	242
۱۰،۸۴	موسوی مجید	۲۸۳	475	گراوندتبار الهام	744
411	موسوی سیدمهدی	276	۲۳۰	گنجعلیکلی مختار	240
30.78.	موسوى بايگى فاطمه	272	۴۳۸	گنجیراد آمنه	749
362	مولوی مهرزاد	۲۸۶	441	لقمانى نازنين	241
۵۲۰	مهرپرور مهلا	777	848	لهراسبي امير	247
147	ميرزايىولدى فرشاد	777	۲۳	مازندراني اكرام	749
۵۷	ميرهولتز كلاوز	274	487	متقى فاطمه	۲۵۰
۵۲۳	نريمانى پروين	79.	۱۹۹	محبى الهام	101
۵۲۵	نصراللهزاده زينب	291	178.101.490	محمدآقايي دلارا	202
V1.07A	نصرتپور نھال	292	178	محمدپور فاطمه	۲۵۳
571.576	نصیرزادہ پریا	۲۹۳	444	محمدزاده شايان	206
188.182	نظرزادهزارع احسان	194	449	محمدي مجيد	۲۵۵
411	نظری فریبا	۲۹۵	299	محمدی نرگس	۲۵۶

themical Society		شي فير)	سة وجرار مين كثقاني	N# KOXF	53
			ڪوچهارين طرس ٽزه		
		و ۳۰ آبان	و واسکاه اصفهان ۲۹	X # K O X #	
۵۵۸	واحدپور مرتضى	۳۰۶	1.7.071.074	نعمتىكنده ابراهيم	۲٩
449	وادی مهدی	٣٠٧	101.798.477	نكوئى عبدالرضا	۲۹٬
۶٩	واعظ علائي سيدمهدي	۳۰۸	۵۴۰		
548	وزيرى علمدارلو فاطمه	۳۰۹	47.747	نمازيان منصور	۲٩,
١٩	وفائى حسينآبادى محسن	۳۱۰	۵۴۰	نوربخش پروین	۲۹
۲V۸	ھايمس مايكل	311	۳۴.	نورمحمدى حسين	۳۰
۵۴۹	يزدخواستي نگين	317	498	نياد محمود	۳۰
٨٢،١۶٣	یگانگی سعید	۳۱۳	۵۴۳	نیازی مهشید	٣٠
007.000	يوسفى پرنيان	317	۵۳۷	نورانى خميرانى سيدەفاطمە	٣٠
۵۵۸	يوسفيان مهسا	510	۲۳۸	نوربالا محمدرضا	٣٠
A\$1	مناف الم	318	۴ ۸۹	تو می قثام	٣.



Proceeding of

The 24th Iranian Physical Chemistry Conference

University of Isfahan, Isfahan, I. R. Iran November 19-20, 2024

Organized by: Department of Physical Chemistry, University of Isfahan Iranian Chemical Society, Physical Chemistry Division

Scientific Chairman: Dr. Nahid Farzi

Executive Chairman: Dr. Hassan Sabzyan

