



شیمی و مهندسی شیمی

تهران - بهمن ۱۳۹۷

بررسی نظری ساختار مولکولی و انتقال پروتون ۲،۶-دی آمینو پیریدین و سالیسیلیک اسید از طریق محاسبات تئوری تابعی چگال

بهاره زره ساز^۱، ابوالقاسم شاملی^{۲*}

۱- دانشجو کارشناسی شیمی دارویی، دانشگاه علوم پزشکی آزاد اسلامی تهران، دانشکده شیمی دارویی، گروه شیمی دارویی

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

خلاصه :

جامدات اسید-باز به عنوان کاتالیزورها در بسیاری از فرایندها مختلف صنعتی از جمله : پالایش، پتروشیمی، مواد شیمیایی ویژه و باارزش استفاده می شود . در این پژوهش، انتقال پروتون از واکنش بین ۲،۶-دی آمینو پیریدین و سالیسیلیک اسید برای انجام محاسبه های نظریه ی تابعی چگال در سطح B3LYP/6311+G(d, p) انتخاب شد . محاسبه های بهینه سازی، فرکانس، انتقال های الکترونی در طیف سنجی مرئی - فرابنفش، انرژی اوربیتال های مرزی و NBO برای لیگاند ۲،۶-دی آمینو پیریدین- سالیسیلیک اسید به کمک نرم افزار NWChem انجام شد. مقایسه پیک های ارتعاشی لیگاند انتقال پروتون تهیه شده و گونه های دهنده و پذیرنده پروتون، تشکیل پیوند هیدروژنی بین مولکولی در لیگاند را نشان می دهد. نتیجه های طیف سنجی نظری و تجربی همخوانی خوبی نشان می دهند. پیک های محاسبه ای طیف سنجی مرئی -فرابنفش این لیگاند مربوط به انتقال های ILCT در هر دو گونه ی دهنده و پذیرنده با ویژگی $n \rightarrow \pi^*$ می باشند. پیوندهای هیدروژنی $O-H \cdots N$ و $N-H \cdots O$ باعث پایداری ترکیب انتقال پروتون ذکر شده به مقدار ۵۶- کیلوژول/مول می شوند.

کلمات کلیدی: نظریه ی تابعی چگال، انتقال پروتون، ۲،۶-دی آمینو پیریدین، سالیسیلیک اسید.

1. مقدمه

جامدات اسید-باز به عنوان کاتالیزورها در بسیاری از فرایندها مختلف صنعتی از جمله : پالایش، پتروشیمی، مواد شیمیایی ویژه و باارزش استفاده می شوند [۱،۲]. مکانیسم واکنش ها ممکن است از طریق کاتالیزور اسید، باز یا دوعاملی اسید-باز انجام شود. لازم به ذکر است در سال ۱۹۹۹، اسیدها در حدود ۸۰ درصد از پروسه های صنعتی مورد استفاده بوده اند؛ در مقابل حدود ۲۰ درصد برای هر دو کاتالیزور باز و اسید-باز مورد استفاده قرار می گرفته است [۱] که عمدتاً به دلیل مناسب بودن کاتالیز اسید به واکنش های اصلی (بنام کراکینگ)، مربوط به تبدیل نفت به محصولات با ارزش است. تلاش بسیار مهم که به طور طبیعی برای تحقیق، سنتز و توسعه کاتالیزورهای فعال و انتخابی برای فرایندهای پالایش و

¹ Email: shameli678@gmail.com