

## محاسبات شیمی کوانتومی بر پایه نظریه تابعیت چگالی روی آفتکش دیازینون

فرزاد جواهری<sup>۱</sup>، زهرا شریعتی نیا<sup>۲</sup>، محمد حسن موسی زاده<sup>۳</sup>

۱- کارشناسی ارشد، شیمی معدنی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)

۲- عضو هیات علمی دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)

۳- عضو هیات علمی دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)

### چکیده

در پژوهش حاضر به جهت بررسی اثر آفتکش‌های ارگانوفسفره روی اسید آمینه سرین به مطالعه محاسبات شیمی کوانتومی بر پایه نظریه تابعیت چگالی روی آفتکش دیازینون و مشتقات آن همچنین کمپلکس‌های این مشتقات با سرین پرداخته شد. محاسبات شیمی کوانتومی DFT با روش B3LYP و مجموعه پایه 31-6G(d,p) انجام گرفت. انرژی پایداری و ممان دوقطبی این سیستم‌ها اندازه‌گیری شدند. آنتالپی و انرژی آزاد گیبس کمپلکس‌های دیازینون همگی مثبت است که گرماگیر بودن و غیرخودبخودی بودن تشکیل این کمپلکس‌ها را نشان می‌دهد. مقدار باند گپ که از اختلاف انرژی اوربیتال‌های هومو و لومو محاسبه شده است، در کمپلکس‌های دیازینون نزدیک به هم و در حدود ۵/۷ الکترون ولت است. مقادیر ممان دوقطبی این کمپلکس‌ها در بازه ۳/۴ تا ۱۰/۱ الکترون ولت قرار دارند. در ادامه مطالعه به بررسی توصیف‌گرهای کوانتوم مکانیکی پرداخته شد و در تعیین بهترین کمپلکس‌ها از آن‌ها استفاده گردید. طول و زوایای پیوند ترکیبات قبل و بعد از تشکیل کمپلکس محاسبه و مقایسه گردید و تغییر زوایا و فرم کلی ساختارها جداگانه بررسی شد. داده‌های QTAİM مطالعه شد و ماهیت پیوندهای موجود بررسی شد. ماهیت پیوند بین اسیدآمینه سرین با کلیه مشتقات دیازینون الکترواستاتیک بوده و برهمکنش‌های درون ملکولی نشان‌دهنده پایداری این کمپلکس‌ها است.

**کلمات کلیدی:** محاسبات شیمی کوانتومی، نظریه تابعیت چگالی، آفتکش‌های ارگانو

فسفره، دیازینون، DFT.