

اثرات حلال: مطالعات نظریه تابعی دانسیته ترانس - سینامالدهید

لیلی رحیمی اهر^{۱*} و زهره رحیمی اهر^۲

^۱گروه شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر، اهر، ایران

^۲گروه مهندسی شیمی، دانشگاه اصفهان، اصفهان، ایران

تاریخ دریافت: ۹۴/۰۹/۱۴ - تاریخ تصحیح: - تاریخ پذیرش: ۹۴/۱۲/۱۵

چکیده

در این تحقیق، گاف انرژی HOMO-LUMO، قطبش پذیری، پارامترهای ساختاری، جرم مولکولی، سختی، پتانسیل شیمیایی و شاخص الکتروندوستی ترانس - سینامالدهید یکی از مواد موثره دارچین در فاز گازی و در حلال‌های اتانول، استون و دی کلرومتان محاسبه شده است. محاسبات با استفاده از نظریه تابعی دانسیته با روش B3LYP و با مجموعه پایه‌های 6-311G+(d,p) و DGDZVP بر روی ترکیب انجام شده است. مطابق محاسبات انجام شده گاف انرژی HOMO-LUMO و سختی در فاز گازی بیشترین مقدار و در حلال اتانول کمترین مقدار، قطبش پذیری، نرمی، ممان دو قطبی، الکتروندوستی در حلال اتانول بیشترین مقدار و در فاز گازی کمترین مقدار و پتانسیل شیمیایی ترکیب در حلال دی کلرومتان بیشترین مقدار و در فاز گازی کمترین مقدار است.

واژگان کلیدی: اثرات حلال، گاف انرژی HOMO-LUMO، ترانس - سینامالدهید، DFT

۱- مقدمه

دارچین، درخت همیشه سبز کوچک با ارتفاع ۱۰ الی ۱۵ متر است. این درخت بومی سریلانکا و هند است [۱]. دارچین حاوی روغن اسانس دار، ترکیبات صمغی، سینامیک اسید، سینامالدهید و سینامات است. روغن اسانس دار مانند ترانس-سینامالدهید، کاربوفیلین اکسید، L- برنغول، L- بورنیل استات، اوژنول، β - کاربوفیلین، E- نرولیدول و سینامیل استات توسط تونگ و همکاران گزارش شده است. برخی از ترکیبات دیگر ترپینولین، α - ترپینئول، α - کوبین و α - توجن است [۱ و ۲]. دارچین دارای خواص ضد التهابی [۳]، آنتی اکسیدان [۴ و ۵]، ضد سرطان [۶ و ۷] و ضد باکتری [۸ و ۹] بوده و حاوی سینامالدهید به عنوان ترکیب اصلی است که ۵/۰ - ۱۰/۰٪ اسانس فرار دارد و تقریباً ۷۵٪ اسانس فرار را سینامالدهید تشکیل می‌دهد و مسئول خاصیت آنتی باکتریایی آن است [۱۰ و ۱۱]. در این مطالعه سینامالدهید به عنوان هدف انتخاب شده است.

سینامالدهید از مواد تشکیل دهنده اصلی روغن دارچین است و بوی قوی دارچین را دارد [۱۲]. سینامالدهید در مواد غذایی، نوشیدنی، محصولات پزشکی عطر، لوازم آرایشی، صابون، مواد پاک کننده، کرم‌ها و لوسیون‌ها استفاده می‌شود.

سینامالدهید به عنوان روشن کننده در فرآیندهای آبکاری، مواد دافع حیوانات، جاذب حشرات و عامل ضد قارچ نیز استفاده می-شود [۱۳].

هدف از این تحقیق محاسبات مربوط به بهینه سازی ساختار مولکولی، انرژی بهینه شده، ممان دوقطبی، قطبش پذیری، جرم مولکولی، بار الکتریکی اتمها، E_{HOMO} ، E_{LUMO} ، گاف انرژی (اختلاف HOMO-LUMO)، سختی کل، نرمی و الکترون دوستی در فاز گازی و در حلال های اتانول، استون و دی کلرومتان ترکیب ترانس- سینامالدهید به عنوان یکی از مواد موثره دارچین و مقایسه فاز گازی ترکیب با حلال های مطالعه شده است. محاسبات با روش DFT/B3LYP و با مجموعه پایه-های 6-311G+(d,p) و DGDZVP در فاز گازی و مقایسه آن در حلال های مختلف برای اولین بار انجام شده است. ساختار مولکولی ترانس- سینامالدهید در فاز گازی با محاسبات DFT/B3LYP/6-31G**، DFT/MP2/cc-pVTZ و با روش پراش الکترونی توسط ایگاو و همکاران مطالعه شده است [۱۲].

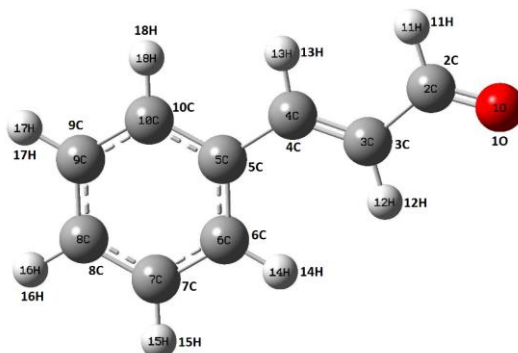
۲- جزئیات محاسبات

محاسبات توسط نرم افزار گوسین 09W [۱۴]، با روش DFT/B3LYP [۱۷-۱۵] و با مجموعه پایه های DGDZVP و 6-311G+(d,p) انجام شده است.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- ساختار مولکولی و محاسبات DFT

محاسبات نشان می دهد ساختار ترانس- سینامالدهید مسطح بوده و به گروه نقطه ای C_s تعلق دارند. ساختار مولکولی بهینه شده با استفاده از DFT/B3LYP/6-311G+(d,p) در (شکل ۱) و پارامترهای هندسی بهینه سازی با استفاده از DFT (نظریه تابعی دانسیته) با روش B3LYP و با مجموعه پایه های 6-311G+(d,p) و DGDZVP در (جدول ۱) نشان داده شده است.



شکل ۱- ساختار مولکولی بهینه شده ترانس- سینامالدهید با استفاده از DFT/B3LYP/6-311G+(d,p)

جدول ۱. پارامترهای هندسی بهینه‌سازی ترانس - سینامالدهید با روش DFT/B3LYP و با مجموعه پایه‌های 6-311G+(d,p) و DGDZVP

روش و مجموعه پایه		مقادیر طول پیوند (Rn) و زاویه پیوند (Am)				DFT/B3LYP/DGDZVP				
		DFT/B3LYP/6-311G+(d,p)				فاز گاز	اتانول	استون	دی کلرومتان	GED ^a [12]
	طول پیوند (Å)	فاز گاز	اتانول	استون	دی کلرومتان	فاز گاز	اتانول	استون	دی کلرومتان	
R1	R(1,2)	1.214	1.224	1.224	1.223	1.224	1.233	1.233	1.232	1.225
R2	R(2,3)	1.463	1.454	1.454	1.455	1.467	1.459	1.459	1.460	1.473
R3	R(2,11)	1.112	1.108	1.108	1.108	1.113	1.109	1.109	1.109	
R4	R(3,4)	1.347	1.351	1.351	1.350	1.353	1.357	1.357	1.356	1.348
R5	R(3,12)	1.085	1.085	1.085	1.085	1.088	1.087	1.087	1.087	
R6	R(4,5)	1.462	1.459	1.459	1.459	1.465	1.463	1.463	1.463	1.470
R7	R(4,13)	1.090	1.089	1.089	1.089	1.092	1.091	1.091	1.091	
R8	R(5,6)	1.407	1.408	1.408	1.408	1.411	1.413	1.413	1.413	1.408
R9	R(5,10)	1.405	1.407	1.407	1.406	1.410	1.411	1.411	1.411	1.406
R10	R(6,7)	1.388	1.389	1.389	1.389	1.393	1.394	1.394	1.394	1.390
R11	R(6,14)	1.083	1.083	1.083	1.083	1.086	1.086	1.086	1.086	
R12	R(7,8)	1.397	1.398	1.398	1.398	1.402	1.404	1.404	1.403	1.398
R13	R(7,15)	1.084	1.084	1.084	1.084	1.087	1.087	1.087	1.087	
R14	R(8,9)	1.393	1.394	1.394	1.394	1.398	1.400	1.400	1.399	1.395
R15	R(8,16)	1.084	1.084	1.084	1.084	1.087	1.087	1.087	1.087	
R16	R(9,10)	1.391	1.392	1.392	1.392	1.396	1.397	1.397	1.397	1.392
R17	R(9,17)	1.084	1.084	1.084	1.084	1.087	1.087	1.087	1.087	
R18	R(10,18)	1.085	1.085	1.085	1.085	1.088	1.088	1.088	1.088	
زاویه پیوند (°)										
A1	A(1,2,3)	124.603	124.695	124.695	124.694	124.410	124.482	124.482	124.482	126.6
A2	A(1,2,11)	120.532	120.066	120.072	120.110	120.525	120.059	120.064	20.102	
A3	A(3,2,11)	114.864	115.238	115.233	115.196	115.064	115.459	115.454	115.416	
A4	A(2,3,4)	120.638	120.123	120.131	120.192	120.723	120.222	120.231	120.289	115.3
A5	A(2,3,12)	116.243	116.920	116.910	116.839	116.174	116.818	116.808	116.742	
A6	A(4,3,12)	123.119	122.957	122.958	122.970	123.103	122.960	122.961	122.969	
A7	A(3,4,5)	128.214	127.998	128.001	128.024	128.144	127.919	127.922	127.943	128.3
A8	A(3,4,13)	116.954	117.100	117.098	117.087	116.871	117.031	117.029	117.016	
A9	A(5,4,13)	114.832	114.902	114.900	114.890	114.985	115.05	115.049	115.041	
A10	A(4,5,6)	122.942	122.982	122.981	122.976	122.977	23.016	123.014	123.006	122.0
A11	A(4,5,10)	118.780	118.552	118.555	118.579	118.728	118.504	118.507	118.533	
A12	A(6,5,10)	118.277	118.466	118.463	118.445	118.294	118.481	118.478	118.461	118.6
A13	A(5,6,7)	120.658	120.537	120.538	120.549	120.646	120.526	120.528	120.539	121.0
A14	A(5,6,14)	119.969	120.148	120.146	120.128	120.042	120.234	120.232	120.210	
A15	A(7,6,14)	119.372	119.315	119.316	119.323	119.312	119.239	119.240	119.251	
A16	A(6,7,8)	120.334	120.302	120.303	120.307	120.359	120.328	120.329	120.332	118.7
A17	A(6,7,15)	119.722	119.743	119.742	119.740	119.751	119.766	119.766	119.764	
A18	A(8,7,15)	119.944	119.955	119.955	119.953	119.890	119.906	119.906	119.904	
A19	A(7,8,9)	119.753	119.867	119.865	119.855	119.704	119.815	119.814	119.804	122.1
A20	A(7,8,16)	120.068	120.010	120.010	120.015	120.095	120.038	120.039	120.044	
A21	A(9,8,16)	120.179	120.124	120.124	120.13	120.201	120.147	120.148	120.153	
A22	A(8,9,10)	119.920	119.907	119.906	119.906	119.93	119.918	119.918	119.918	118.3
A23	A(8,9,17)	120.175	120.184	120.184	120.182	120.149	120.165	120.164	120.162	
A24	A(10,9,17)	119.905	119.909	119.909	119.911	119.922	119.917	119.918	119.921	
A25	A(5,10,9)	121.058	120.922	120.924	120.938	121.066	120.932	120.934	120.947	121.4
A26	A(5,10,18)	119.188	119.238	119.238	119.235	119.293	119.352	119.352	119.348	
A27	A(9,10,18)	119.755	119.841	119.839	119.828	119.641	119.716	119.714	119.705	

a: Gas Electron Diffraction

طول پیوند C-C در حلقه بنزن ($1/399 \pm 0/001$) آنگستروم است [۱۸]. مقادیر محاسبه شده طول پیوند نشان می‌دهد طول پیوند C-C در حلقه آروماتیک در فاز گازی با استفاده از DFT/B3LYP/6-311G+(d,p) از $1/391$ آنگستروم تا $1/406$ آنگستروم و با استفاده از DFT/B3LYP/DGDZVP از $1/393$ آنگستروم تا $1/411$ آنگستروم است که این محدوده طول پیوند به علت وجود eهای نامستقر بین حلقه بنزن با دیگر قسمت‌های مولکول می‌تواند باشد. طول پیوند C-H در حلقه بنزن ($0/005$) $1/101 \pm$ آنگستروم [۱۸] است. طول پیوند C-H در فاز گازی در حلقه آروماتیک با استفاده از DFT/B3LYP/6-311G+(d,p) از $1/083$ آنگستروم تا $1/085$ آنگستروم و با استفاده از DFT/B3LYP/DGDZVP از $1/086$ آنگستروم تا $1/088$ آنگستروم است.

جرم مولکولی ترکیب محاسبه شده در فاز گازی و در حلال‌های مطالعه شده با مجموعه پایه‌های 6-311G+(d,p) و DGDZVP، $132/05751$ (amu) است.

انرژی بهینه شده، ممان دو قطبی و قطبش‌پذیری ترانس- سینامالدهید در (جدول ۲) آورده شده است. طبق محاسبات انجام شده ممان دو قطبی و قطبش‌پذیری در حلال اتانول بیشترین مقدار و در فاز گازی کمترین مقدار است. مطابق (جدول ۲) تغییرات ممان دو قطبی و قطبش‌پذیری به این ترتیب تغییر می‌کند (Ethanol > Acetone > Dichloromethane > Gas). ممان دو قطبی توزیع بار مولکول را نشان می‌دهد و به عنوان یک بردار در سه بعد است. بنابراین، می‌تواند به عنوان توصیفگر جهت شرح حرکت باری در سراسر مولکول استفاده شود. جهت بردار ممان دو قطبی در مولکول بستگی به مراکز بارهای مثبت و منفی دارد [۱۹].

جدول ۲. انرژی بهینه شده، ممان دو قطبی و قطبش‌پذیری با روش DFT/B3LYP و با مجموعه پایه‌های 6-311G+(d,p) و DGDZVP

روش و مجموعه پایه	DFT/B3LYP/6-311G+(d,p)				DFT/B3LYP/DGDZVP			
	فاز گاز	اتانول	استون	دی کلرومتان	فاز گاز	اتانول	استون	دی کلرومتان
E(RB3LYP) (a.u.)	-423.0929	-423.1024	-423.1023	-423.1013	-423.0170	-423.0269	-423.0267	-423.0257
ممان دو قطبی (Debye)	4.9175	6.5574	6.5338	6.3673	4.8974	6.4107	6.3896	6.2400
قطبش‌پذیری (a.u.)	122.0643	169.0781	168.2825	162.8160	112.2196	153.6921	153.0152	148.3256

۳-۲- اوربیتال‌های مولکولی HOMO و LUMO

بالاترین اوربیتال مولکولی پر شده و پایین‌ترین اوربیتال مولکولی خالی پارامترهای بسیار مهمی در شیمی کوانتوم هستند [۲۰ و ۲۱]. بالاترین اوربیتال مولکولی پر شده و پایین‌ترین اوربیتال مولکولی خالی هر دو اوربیتال‌های اصلی هستند که در

پایداری شیمیایی سهیم هستند [۲۲]. HOMO نشان دهنده توانایی دادن الکترون و LUMO نشان دهنده توانایی پذیرفتن الکترون است [۲۳].

انرژی HOMO بالاتر مربوط به مولکول واکنش پذیرتر در واکنش با الکتروفیلها، در حالی که انرژی LUMO کمتر مربوط به واکنش های مولکولی با هسته دوستها ضروری است [۲۴]. با توجه به مقادیر HOMO ترتیب واکنش پذیری ترکیب ترانس- سینامالدهید با الکتروفیلها و با توجه به مقادیر LUMO ترتیب واکنش پذیری ترکیب سینامالدهید با هسته دوستها، در فاز گازی و در حلال های مطالعه شده به این ترتیب (Ethanol > Acetone > Dichloromethane > Gas) است.

اختلاف انرژی بین HOMO و LUMO گاف انرژی نامیده می شود. افزایش گاف انرژی بین HOMO و LUMO کمک می کند که مواد از لحاظ شیمیایی مولکول سختی شوند [۱۹]. اختلاف زیاد HOMO و LUMO، پایداری بالا را می رساند. پایداری بالای یک مولکول به مفهوم واکنش پذیری پایین در واکنش های شیمیایی است [۲۵]. در فاز گازی مقدار انرژی HOMO -0.25573 و -0.25281 هارتری و LUMO -0.09244 و -0.09034 هارتری و مقدار گاف انرژی محاسبه 0.16329 و 0.16247 هارتری با روش DFT/B3LYP به ترتیب با مجموعه پایه های 6-311G+(d,p) و DGDZVP محاسبه شده است. مطابق جدول میزان گاف انرژی ترکیب به ترتیب، (Gas > Dichloromethane > Acetone > Ethanol) تغییر می کند. کمترین مقدار گاف انرژی ترکیب ترانس- سینامالدهید مربوط به حلال اتانول و بیشترین مقدار مربوط به فاز گازی است و در (جدول ۳) آورده شده است.

جدول ۳. مقادیر انرژی اوربیتالهای HOMO، LUMO و گاف انرژی مربوط به ترانس- سینامالدهید بر حسب واحد هارتری

روش و مجموعه پایه	DFT/B3LYP/6-311G+(d,p)				DFT/B3LYP/DGDZVP			
	فاز گاز	اتانول	استون	دی کلرومتان	فاز گاز	اتانول	استون	دی کلرومتان
HOMO	-0.25573	-0.25284	-0.25285	-0.25295	-0.25281	-0.25060	-0.25060	-0.25063
LUMO	-0.09244	-0.09367	-0.09363	-0.09336	-0.09034	-0.09194	-0.09190	-0.09159
گاف انرژی	0.16329	0.15917	0.15922	0.15959	0.16247	0.15866	0.1587	0.15904

۳-۳- سختی کل، پتانسیل شیمیایی، الکتروندوستی و نرمی کل

مفهوم سختی در سال ۱۹۸۳ توسط پار و پیرسون [۲۶] اندازه گیری شد. سختی کل [۲۶] توسط $\eta=(I-A)/2$ و پتانسیل شیمیایی [۲۵] توسط $\mu=-(I+A)/2$ ، پتانسیل یونیزاسیون و A، الکترون خواهی تعیین می شود. S (نرمی کل) [۲۷] توسط $S=1/2\eta$ و شاخص الکتروندوستی (ω) [۲۸] با رابطه $\omega=\mu^2/2\eta$ بدست می آید. مطابق تئوری اوربیتال مولکولی [۲۹] $I=-E_{HOMO}$ و $A=-E_{LUMO}$ است و با تقریب کمی با تئوری کوپمن مطابق روابط زیر است.

$$\mu = (E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}}) / 2; \eta = (E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}) / 2 \quad \text{معادله ۱}$$

سختی شیمیایی یک مولکول نشان دهنده پایداری شیمیایی است. گاف انرژی HOMO-LUMO، می‌تواند نشان دهد که مولکول سخت یا نرم است. مولکول‌های با گاف انرژی بالا به عنوان سخت و مولکول‌های با گاف انرژی کم به عنوان نرم شناخته شده است. مولکول‌های نرم قطبش‌پذیرتر از مولکول‌های سخت هستند به این دلیل که آنها نیاز به انرژی کمی به برانگیخته شدن دارند [۳۰]، مقادیر بدست آمده از (جدول ۲) برای قطبش‌پذیری و مقادیر گاف انرژی (جدول ۳) و مقادیر نرمی (جدول ۴) تایید کننده این مطلب است.

نرمی، اندازه‌گیری از واکنش‌پذیری است [۳۱] و مقادیر بدست آمده برای نرمی (جدول ۴) و از مقادیر HOMO ترتیب واکنش‌پذیری ترکیب ترانس- سینامالدهید با الکتروفیل‌ها و مقادیر LUMO ترتیب واکنش‌پذیری ترکیب ترانس- سینامالدهید با هسته دوست‌ها (جدول ۳) (Ethanol > Acetone > Dichloromethane > Gas) نشان می‌دهد که نرمی بیشتر نشان دهنده واکنش‌پذیری بیشتر ترکیب است.

شاخص الکتروندوستی، اندازه‌گیری از توانایی گونه‌ها به پذیرش تعدادی الکترون است [۳۲]. شاخص الکتروندوستی کل (ω) با استفاده از پارامترهای الکترونگاتیوی و سختی شیمیایی برآورد می‌شود. مقدار الکتروندوستی بالا الکتروفیل خوب و مقدار کم الکتروندوستی، هسته دوست خوب را توصیف می‌کند [۳۳]. مقادیر الکتروندوستی (جدول ۴)، مقادیر HOMO و مقادیر LUMO (جدول ۳) با توجه به تغییرات (Ethanol > Acetone > Dichloromethane > Gas) تایید کننده این مطلب است که مقدار الکتروندوستی بالا نشان دهنده الکترون دوست خوب است.

در (جدول ۴) مقادیر سختی کل، پتانسیل شیمیایی، الکتروندوستی و نرمی کل محاسبه شده با روش DFT/B3LYP و با استفاده از مجموعه پایه‌های 6-311G+(d,p) و DGDZVP داده شده است. مطابق جدول در ترانس- سینامالدهید، سختی در فاز گازی بیشترین مقدار و در اتانول کمترین مقدار، پتانسیل شیمیایی در فاز گازی کمترین مقدار و در حلال دی کلرومتان بیشترین مقدار و الکتروندوستی و نرمی در فاز گازی کمترین مقدار و در اتانول بیشترین مقدار را دارد. پتانسیل شیمیایی اندازه‌گیری تمایل الکترونها به رهایی از سیستم است. اختلاف پتانسیل شیمیایی بالا بین دو سیستم به انتقال الکترون کمک می‌کند [۳۴].

جدول ۴. مقادیر سختی کل، پتانسیل شیمیایی، الکتروندوستی و نرمی کل مربوط به ترانس- سینامالدهید با روش DFT/B3LYP و با مجموعه پایه‌های DGDZVP و 6-311G+(d,p)

<i>Trans</i> -cinnamaldehyde		Hardness	Chemical Potential	Electrophilicity	Softness
		$[\eta=(I-A)/2](\text{ev})$	$[\mu=-(I+A)/2](\text{ev})$	$[\omega=\mu^2/2\eta](\text{ev})$	$[S=1/2\eta](\text{ev})^{-1}$
6-311G+(d,p)	Gas	2.2216	-4.7370	3739.2307	166.6403
	Ethanol	2.1656	-4.7144	3799.5265	170.9537
	Acetone	2.1662	-4.7140	3797.6757	170.9000
	Dichloromethane	2.1713	-4.7117	3785.1539	170.5038
DGDZVP	Gas	2.2105	-4.6687	3650.5137	167.4814
	Ethanol	2.1586	-4.6604	3724.8972	171.5032
	Acetone	2.1592	-4.6598	3723.0886	171.4600
	Dichloromethane	2.1638	-4.6560	3709.0574	171.0934
		(Gas > Dichloromethane > Acetone > Ethanol)	(Gas < Ethanol < Acetone < Dichloromethane)	(Gas < Dichloromethane < Acetone < Ethanol)	(Gas < Dichloromethane < Acetone < Ethanol)

۳-۴- بار الکتریکی اتم‌ها

محاسبات بار الکتریکی اتمی مولیکن نقش مهمی به عنوان بار اتم‌ها در ممان دوقطبی، قطبش‌پذیری مولکولی، ساختار الکترونی و بسیاری از خواص مربوط به سیستم‌های مولکولی دارد [۳۵]. بار الکتریکی در روش NBO محاسبه گردیده است و برای یافتن بار دقیق‌تر می‌توان مشابه دستوره‌های [۳۶ و ۳۷] استفاده نمود. توزیع بار مولیکن ترانس- سینامالدهید با استفاده از روش DFT/B3LYP در (جدول ۵) آورده شده است. همانطور که در (جدول ۵) مشاهده می‌شود، در فاز گازی همه اتم‌های هیدروژن بار الکتریکی مثبت دارند. اتم H11، بار مثبت کمتری از دیگر اتم‌های هیدروژن دارد و بیشترین بار منفی به طور عمده در اتم O1 قرار دارد. در مقابل، C2 متصل به O1 بار مثبت بیشتری دارد. این نتایج برای مولکول ترانس- سینامالدهید در حلال‌های اتانول، استون و دی کلرومتان نیز صادق است. مقایسه بار منفی و مثبت اتم‌های O1 و C2 مولکول ترانس- سینامالدهید در فاز گازی و حلال‌های مطالعه شده نشان می‌دهد این مقادیر در حلال اتانول بیشترین مقدار و در فاز گازی کمترین مقادیر بار الکتریکی را دارد (Gas < Dichloromethane < Acetone < Ethanol). تشکیل پیوند هیدروژنی بین حلال و ترکیب در این ترتیب می‌تواند موثر باشد.

جدول ۵. بار الکتريکی اتم‌ها مربوط به ترانس- سینامالدهید با روش DFT/B3LYP و با مجموعه پایه‌های 6-311G+(d,p) و DGDZVP

روش و مجموعه پایه	DFT/B3LYP/6-311G+(d,p)					DFT/B3LYP/DGDZVP			
	فاز گاز و حلال	فاز گاز	اتانول	استون	دی کلرومتان	فاز گاز	اتانول	استون	دی کلرومتان
شماره اتم	(e) بار الکتريکی								
1	O	-0.5329	-0.6031	-0.6021	-0.5950	-0.5722	-0.6367	-0.6358	-0.6293
2	C	0.3842	0.3929	0.3928	0.3920	0.4272	0.4343	0.4342	0.4336
3	C	-0.2816	-0.3030	-0.3027	-0.3005	-0.2747	-0.2948	-0.2945	-0.2925
4	C	-0.1111	-0.0877	-0.0880	-0.0905	-0.1406	-0.1202	-0.1205	-0.1226
5	C	-0.1005	-0.1124	-0.1122	-0.1110	-0.0731	-0.0844	-0.0843	-0.0831
6	C	-0.1643	-0.1664	-0.1664	-0.1660	-0.1764	-0.1795	-0.1794	-0.1790
7	C	-0.1974	-0.2043	-0.2042	-0.2033	-0.1942	-0.2006	-0.2004	-0.1997
8	C	-0.1837	-0.1822	-0.1822	-0.1822	-0.1867	-0.1867	-0.1860	-0.1860
9	C	-0.2018	-0.2086	-0.2084	-0.2077	-0.1988	-0.2051	-0.2050	-0.2043
10	C	-0.1652	-0.1634	-0.1634	-0.1636	-0.1762	-0.1751	-0.1751	-0.1752
11	H	0.1010	0.1200	0.1197	0.1177	0.1086	0.1264	0.1261	0.1241
12	H	0.2087	0.2147	0.2147	0.2142	0.2048	0.2101	0.2101	0.2097
13	H	0.1978	0.2109	0.2107	0.2092	0.2000	0.2136	0.2134	0.2118
14	H	0.2085	0.2167	0.2166	0.2157	0.2073	0.2155	0.2153	0.2145
15	H	0.2108	0.2195	0.2194	0.2185	0.2129	0.2216	0.2215	0.2206
16	H	0.2098	0.2185	0.2184	0.2175	0.2120	0.2208	0.2207	0.2198
17	H	0.2110	0.2201	0.2199	0.2190	0.2128	0.2218	0.2217	0.2207
18	H	0.2065	0.2176	0.2174	0.2161	0.2072	0.2183	0.2181	0.2168
بار کل		0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.00000	0.0000

۴- نتیجه گیری

در این تحقیق محاسبات مربوط به بهینه‌سازی شکل مولکولی، بدست آوردن انرژی مینیمم، جرم مولکولی، ممان دو قطبی، قطبش پذیری، بار الکتريکی اتم‌ها، E_{LUMO} ، E_{HOMO} ، گاف انرژی، سختی کل، نرمی و الکتروندوستی در مولکول ترانس- سینامالدهید در فاز گازی و حلال‌های اتانول، استون و دی کلرومتان انجام شده است. محاسبات با روش DFT/B3LYP و با مجموعه پایه‌های 6-311G+(d,p) و DGDZVP و مقایسه فاز گازی و حلال‌های مطالعه شده برای اولین بار انجام شده است. مطابق محاسبات، تغییرات میزان گاف انرژی و سختی ترکیب در فاز گازی و در حلال‌های مطالعه شده به ترتیب $(Gas > Dichloromethane > Acetone > Ethanol)$ ، قطبش پذیری، نرمی، ممان دو قطبی، الکتروندوستی، مقایسه بار منفی و مثبت اتم‌های O1 و C2 مولکول ترانس- سینامالدهید و از مقادیر HOMO ترتیب واکنش پذیری ترکیب سینامالدهید با الکتروفیل‌ها و از مقادیر LUMO ترتیب واکنش پذیری ترکیب ترانس- سینامالدهید با هسته دوست‌ها به ترتیب $(Ethanol > Acetone > Dichloromethane > Gas)$ و مقایسه پتانسیل شیمیایی ترکیب ترانس- سینامالدهید به ترتیب $(Gas < Ethanol < Acetone < Dichloromethane)$ تغییر می‌کند که نشان دهنده تمایل بیشتر ترکیب در حلال دی کلرومتان به آزاد کردن الکترون است.

۵- مراجع

- [1] V. Jakheta¹, R. Patel, P. Khatri¹, N. Pahuja, S. Garg, A. Pandey, S. Sharma, *J. Adv. Sci. Res.* **1(2)** (2010) 19.
- [2] Y. T. Tung, M. T. Chua, S. Y. Wang, S. T. Chang, *Bioresour. Technol.* **99** (2008) 3908.
- [3] L. K. Chao, K. F. Hua, H. Y. Hsu, S. S. Cheng, J. Y. Liu, S. T. Chang, *J. Agric. Food Chem.* **53** (2005) 7274.
- [4] J. Mancini-Filho, A. Van-Koij, D. A. Mancini, F. F. Cozzolino, R. P. Torres, *Boll. Chim. Farm.* **137(11)** (1998) 443.
- [5] M. A. Murcia, I. Egea, F. Romojaro, P. Parras, A. M. Jimenez, M. Martinez-Tomé, *J. Agric. Food Chem.* **52(7)** (2004) 1872.
- [6] B. E. Shan, Y. Yoshida, T. Sugiura, U. Yamashita, *Int. J. Immunopharmacol.* **21(3)** (1999) 149.
- [7] N. W. Schoene, M. A. Kelly, M. M. Polansky, R. A. Anderson, *Cancer Lett.* **230(1)** (2005) 134.
- [8] S. T. Chang, P. F. Chen, S. C. Chang, *J. Ethnopharmacol.* **77(1)** (2001) 123.
- [9] C. Gupta, A. P. Garg, R. C. Uniyal, A. Kumari, *Afr. J. Microbiol. Res.* **2** (2008) 247.
- [10] B. Ouattara, R. E. Simard, R. A. Holley, G. J. -P. Piette, A. Be'gin, *Int. J. Food Microbiol.* **37** (1997) 155.
- [11] L. B. Bullerman, F. Y. Lieu, S. A. Seier, *J. Food Sci.* **42** (1977) 1107.
- [12] T. Egawa, R. Matsumoto, D. Yamamoto, H. Takeuchi, *J. Mol. Struct.* **892** (2008) 158.
- [13] https://ntp.niehs.nih.gov/ntp/htdocs/lt_rpts/tr514.pdf
- [14] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J.A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz and J. Cioslowski, D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT (2009).
- [15] R. G. Parr, W. Yang, *Density functional theory of atoms and molecules*. Oxford, New York, (1989).
- [16] A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **98** (1993) 5648.
- [17] C. Lee, W. Yang, R. G. Parr, *Phys. Rev. B.* **37(2)** (1988) 785.
- [18] K. Tamagawa, T. Iijima, M. Kimura, *J. M. Struct.* **30(2)** (1976) 243.

- [19] K. S. Vinod, S. Periandy, M. Govindarajan, *Spectrochim. Acta. A*, **136** (2015) 808.
- [20] I. Fleming, *Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions*. John Wiley and Sons, New York, (1976) 5.
- [21] K. Fukui, T. Yonezawa, H. Shingu, *J. Chem. Phys.* **20** (1952) 722.
- [22] S. Gunasekaran, R. A. Balaji, S. Kumaresan, G. Anand, S. Srinivasan, *Can. J. Anal. Sci. Spectrosc.* **53(4)** (2008) 149.
- [23] S. Sudha, M. Karabacak, M. Kurt, M. Cinar, N. Sundaraganesan, *Spectrochim. Acta A*, **84** (2011) 184.
- [24] A. Rauk, *Orbital Interaction Theory of Organic Chemistry*, 2nd edn. John Wiley & Sons, New York, (2001) 34.
- [25] Z. Zhou, R. G. Parr, *J. Am. Chem. Soc.* **112** (1990) 5720.
- [26] R. G. Parr, R. G. Pearson, *J. Am. Chem. Soc.* **105** (1983) 7512.
- [27] G. H. Liu, R. G. Parr, *J. Am. Chem. Soc.* **117** (1995) 3179.
- [28] R. G. Parr, L. V. Szentpály, S. Liu, *J. Am. Chem. Soc.* **121** (1999) 1922.
- [29] R. G. Pearson, *Proc. Natl Acad Sci. USA*. **83** (1986) 8440.
- [30] V. Balachandran, G. Mahalakshmi, A. Lakshmi, A. Janaki, *Spectrochim. Acta. A*, **97** (2012) 1101.
- [31] V. Kumar, S. Kishor, L. M. Ramaniah, *J. Mol. Model.* **19** (2013) 3175.
- [32] E. Chamorro, P. K. Chattaraj, P. Fuentealba, *J. Phys. Chem. A*. **107** (2003) 7068.
- [33] E. E. Ebenso, M. M. Kabanda, T. Arslan, M. Saracoglu, F. Kandemirli, L. C. Murulana1, A. K. Singh, S. K. Shukla1, B. Hammouti5, K. F. Khaled, M. A. Quraishi, I. B. Obot, N.O. Eddy, *J. Electrochem. Sci.* **7** (2012) 5643.
- [34] J. Andrés Bort, J. Bertrán Rusca, *Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques*, Universitat Jaume I, (2007) 242.
- [35] K. Carthigayan, S. Xavier, S. Periandy, *Spectrochim. Acta. A*, **142** (2015) 350.

[۳۶] ص. باوفا، ف. باوفا، آموزش کاربردی نرم افزارهای Gaussian, GaussView, ChemOffice, HyperChem & ATM انتشارات اندیشه سرا، (۱۳۸۹).

[۳۷] ل. رحیمی اهر، ز. رحیمی اهر، ل. اسدی، دانشگاه سمنان، *مجله شیمی کاربردی*، شماره ۲۶ (۱۳۹۲) ص ۵۳.