

## عنوان مقاله:

تأثیر جایگزینی حلقه ی پیریدین بهجای حلقه ی فنیل در عملکرد قیچی-مولکولی با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتوم

## محل انتشار:

اولین همایش ملی فناوری های نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

## نویسندگان:

سارا سلیمانی گرگانی - استادیار و عضو هیات علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکزی

مرحانه صمدی زاده - تهران، میدان صنعت، خیابان سیمای ایران، مجتمع دانشگاهی پیامبر اعظم ص، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکز،

## خلاصه مقاله:

قیچی مولکولی، وسیله ای در حدود چند نانومتر است که باید شامل سه قسمت ضروری محور، دو تیغه و دو دسته باشد. در نمونه ای از قیچی های مولکولی ساخته شده از مولکول فروسن به عنوان محور، دو گروه فنیل به عنوان تیغه ها و دو گروه فنیل دیگر که به واسطه ی پیوند اتیلنی با واحد آزو بنزن پیوند خورده اند به عنوان دسته ها استفاده می شود. در یک کار محاسباتی DFT از حلقه ی پیریدین به جای حلقه ی فنیل به ترتیب در تیغه ها، دسته ها و در واحد آزو بنزن قیچی مولکولی استفاده شد تا تأثیر این جایگزینی در زاویه ی باز و بسته شدن تیغه های قیچی مولکولی و هم چنین تغییرات انرژی مربوط به تبدیل فرم باز به فرم بسته ی قیچی مولکولی مورد نظر، بررسی شود. در این محاسبات از روش B3LYP/3-21G\* استفاده شده و پایدارترین فرم برای تمامی حالت های جایگزینی به دست آمد. بررسی تأثیرات ناشی از جایگزینی حلقه ی پیریدین به جای حلقه ی فنیل در قسمت های مختلف قیچی مولکولی نشان می دهد که، قرار گرفتن حلقه ی پیریدین بهجای حلقه ی فنیل در تیغه ها، تغییر چندانی در زاویه ی بین دو تیغه ایجاد نمی کند، اما در اثر جایگزینی حلقه ی پیریدین بهجای حلقه ی فنیل در دسته ها، اختلاف زاویه ی دو تیغه قیچی مولکولی در دو فرم باز و بسته ی آن تا حد زیادی کاهش می یابد که این امر موجب پایین آمدن کارایی قیچی مولکولی خواهد شد. از سوی دیگر، قرار گرفتن حلقه ی پیریدین به جای حلقه ی فنیل در واحد آزو بنزن، سبب باز و بسته شدن تیغه های قیچی مولکولی با زاویه ی بیشتر به ازای صرف انرژی کمتر شده که در نتیجه ی آن کارایی قیچی مولکولی افزایش خواهد یافت.

## کلمات کلیدی:

قیچی مولکولی- آزو بنزن- پیریدین- فروسن

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/212245>

