

بررسی مکانیک کوانتومی انتقال‌های الکترونی طیف‌های UV-Vis در برخی مشتقات دارویی پیریمیدوکینولین: مطالعه اربیتال‌های انتقال طبیعی

سارا فخرایی^{۱*}، فاطمه مستقر^۲

مشخصات نویسنده اول

۱ و * - دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور تهران، ایران

رایانامه: fakhraee@pnu.ac.ir

مشخصات نویسنده دوم

۲ - دانشجوی دکتری، شیمی آلی، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور تهران، ایران

رایانامه: fmostaghar@gmail.com

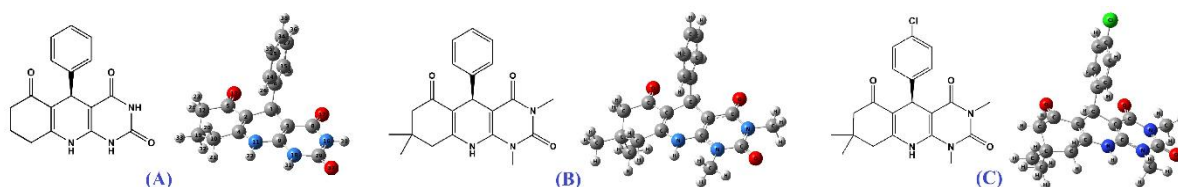
واژگان کلیدی: پیریمیدوکینولین، تابعی چگالی وابسته به زمان، TDDFT، انتقال‌های الکترونی، اربیتال انتقال طبیعی

۱- مقدمه

پیریمیدوکینولین‌ها هتروسیکل‌های نیتروژن دار 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 آنزیم‌ها و گیرنده‌های مختلف سلولی تاثیر گذاشته و باعث توقف چرخه سلولی‌های سرطانی می‌شوند. با توجه به اهمیت pyrimido[4,5-b]quinoline‌ها، انجام 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 می‌گردد. طیف‌های جذبی UV-Vis و انتقال‌های الکترونی برای هر سه مولکول محاسبه و مورد بررسی قرار می‌گیرد.

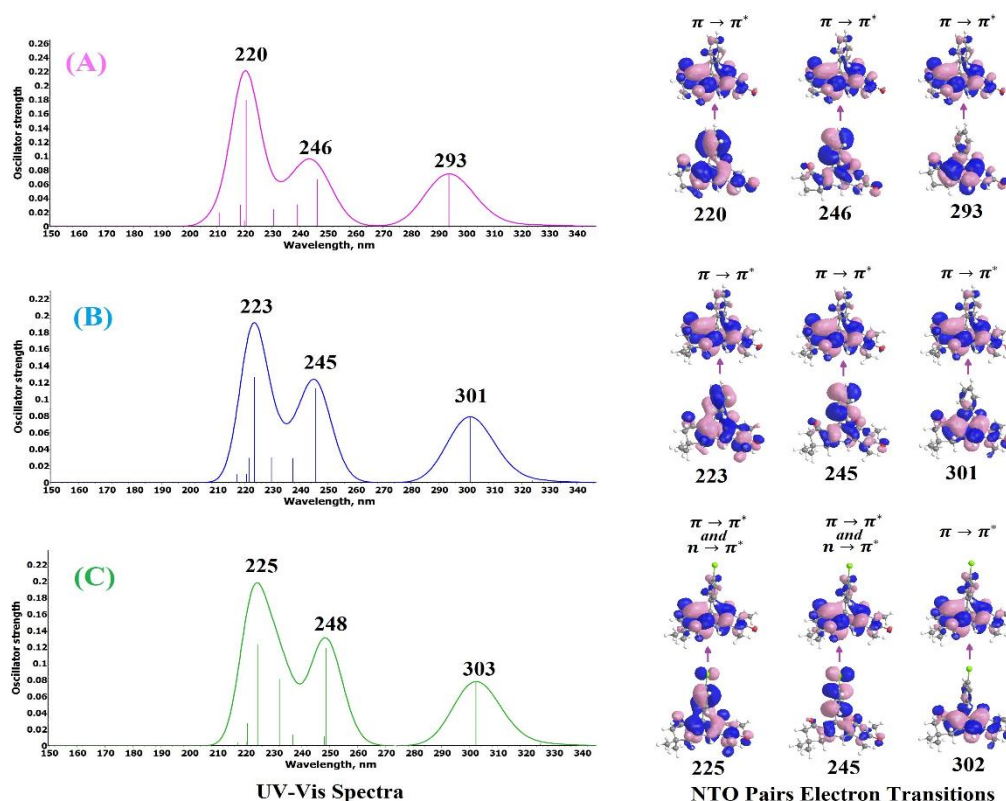
۲- روش محاسبات

این تحقیق ساختار الکترونی سه مولکول مشتق شده از pyrimido[4,5-b]quinoline با بدنه مشترک tetrahydropyrimido[4,5-b]quinolone-2,4,6(1H,3H,7H)-trione را مطالعه می‌کند (A، B 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، B 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.



شکل ۲: نمایش طیف‌های UV-Vis و اربیتال‌های حفره-ذره NTO مربوط به هر باند جذبی به همراه نمایش نوع انتقال‌ها

۳- بحث و نتیجه‌گیری:

طیف‌های جذبی شکل ۲ نشان می‌دهد که در این ساختارها انتقال‌های الکترونی در ناحیه ماورابنفش اتفاق می‌افتد. مقایسه طیف سه ساختار A، B و C نشان می‌دهد که طول موج‌های جذبی متناظر برای این ساختارها از A به C به طور واضح افزایش می‌یابد 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 ساختار، انتقال‌های الکترونی در C با طول موج بیشتر و انرژی کمتری انجام می‌گردد. در بررسی زوج اربیتال‌های حفره-ذره NTO درگیر در انتقالات الکترونی در شکل ۲ مشاهده می‌شود که در مولکول‌های A و B انتقال‌ها فقط از نوع $\pi \rightarrow \pi^*$ بوده که از گروه فنیل به بدنه پیریمیدو-کینولین انجام می‌گردد، در حالی که با افزودن اتم کلر بر گروه فنیل در مولکول C، انتقال الکترونی $n \rightarrow \pi^*$ هم به انتقال‌های $\pi \rightarrow \pi^*$ اضافه می‌شود. در مولکول C انتقال الکترونی $n \rightarrow \pi^*$ از زوج‌های غیرپیوندی اتم کلر به بدنه پیریمیدو-کینولین انجام می‌گردد. همچنین محاسبه مقادیر شکاف انرژی اربیتال‌های مولکولی (MOs) مقادیر (eV) ۶/۸، ۶/۶ و ۶/۱ را به ترتیب برای A، B و C نشان داد. کاهش شکاف انرژی از A به C نشان‌دهنده افزایش واکنش‌پذیری این مولکول‌ها در حضور نور فرابنفش می‌باشد.

منابع و مراجع:

- [1] Zare, A. & Dianat, M. (2021). A highly efficient and green approach for the synthesis of pyrimido[4,5-*b*]quinolines using *N,N*-diethyl-*N*-sulfoethanaminium chloride. *Zeitschrift für Naturforschung B*, 76(2), 85-90.
- [2] Gaussian 16, Revision C.01, Frisch, M. J.; Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.