

بررسی نقش کاتیون عامل دار شده در برهم کنش کارواکرول با مایعات یونی آمینواسیدی به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی

زهرا رضاپور^۱، محمد تقی حامدموسویان^{۲*}، محمد رزمخواه^۳، فاطمه موسوی بایگی^۴

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی شیمی، شیمی، مهندسی و دانشگاه فردوسی مشهد (Zahra.rezapour@mail.um.ac.ir)
۲ و ۳- نویسنده مسئول: استاد، مهندسی شیمی، شیمی، مهندسی و دانشگاه فردوسی مشهد (mosavian@um.ac.ir)
۳- استادیار، مهندسی شیمی، شیمی، مهندسی و دانشگاه فردوسی مشهد (mohammad.razmkhah@mail.um.ac.ir)
۴- دانشیار، شیمی-فیزیک، شیمی، علوم و دانشگاه فردوسی مشهد (moosavibaigi@um.ac.ir)

واژگان کلیدی: مایعات یونی آمینواسیدی، کارواکرول، گروه عاملی، شبیه سازی دینامیک مولکولی.

۱- مقدمه

تقاضای مواد غذایی سالم باعث ظهور افزودنی های گیاهی شده است. کارواکرول (CAR) ترکیب زیستی گیاهی با فرمول شیمیایی $C_{40}H_{56}O$ و خواص آنتی اکسیدانی، آنتی باکتریایی و ضدسرطانی است و در گیاهانی مانند پونه کوهی و آویشن یافت می شود^۱ و در صنایع غذایی، آرایشی و بهداشتی کاربرد دارد^۲. خواص بی نظیر CAR باعث الزام استخراج آن از گیاهان حاوی این ترکیب زیستی شده است. استخراج با حلال روشی مطلوب برای استخراج این ترکیبات است که حلال انتخابی بسیار مهم می باشد. به دلیل ارتباط مستقیم CAR با سلامت مردم، استفاده از حلال های سبز اهمیت می یابد. مایعات یونی آمینواسیدی (AAILs) با خواصی مانند فشاربخار کم، حلالیت و زیست تخریب پذیری بالا، سمیت بسیار پایین و پایداری گرمایی و شیمیایی بالا^۱ امروزه به عنوان حلال های سبز مورد توجه اند. در این پژوهش برهم کنش CAR با AAILs متشکل از کاتیون ایمیدازولیوم و آنیون گلايسينات مورد بررسی قرار می گیرد. به نحوی که زنجیره ی پروپیل ایمیدازولیوم با سه گروه کربوکسیل (COOH)، آمین (NH₂) و هیدروکسیل (OH) عامل دار و نقش ساختار کاتیون در برهم کنش CAR با AAILs مورد مطالعه قرار می گیرد.

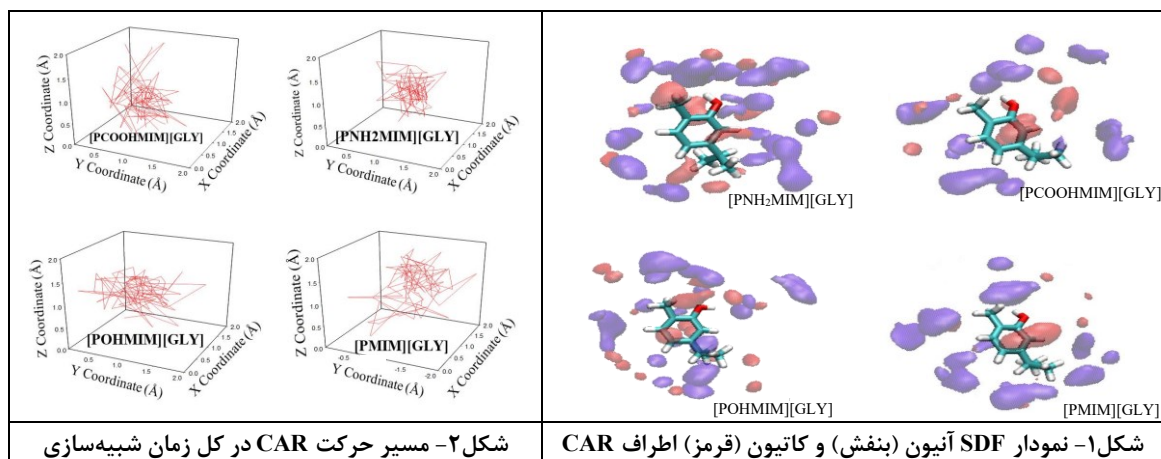
۲- روش ها

ساختار الکترونی گونه ها در سطح محاسباتی B3LPY/6-311++(d,p) بهینه سازی و با روش NBO بارهای جزئی اتمی محاسبه شد. با توجه به توده بودن سیستم ها شبیه سازی در جعبه ی مکعب انجام و ۲۱۶ جفت یون و ۴ مولکول CAR در نرم افزار دی_ال پلی^۵ ۲/۱۸ تکرار شد. از میدان نیروی AMBER استفاده و شبیه سازی در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm انجام شد. شعاع قطع ۱۸ Å و گام زمانی ۱ fs بوده و شبیه سازی به مدت ۳۵ ns صورت پذیرفت.

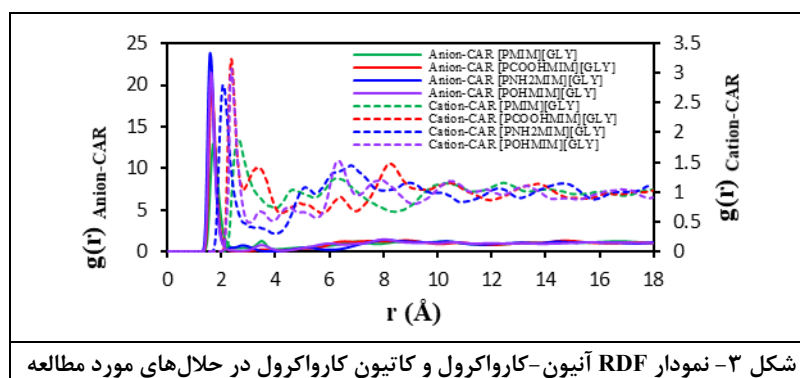
۳- بحث و نتیجه گیری

بررسی نتایج حاصل از تابع توزیع فضایی (SDF) (شکل ۱) نشان می دهد چگالی احتمال حضور آنیون (ابر بنفش) در اطراف CAR بیشتر از کاتیون (ابر قرمز) است. این در حالی است که بیشترین چگالی احتمال حضور مربوط به آنیون [GLY]⁻ در حلال [PNH₂MIM][GLY] می باشد. همچنین مسیر حرکت CAR در کل زمان شبیه سازی رصد شد و مطابق با شکل ۲، CAR در سیستم [PMIM][GLY] بیشترین و در سیستم [PNH₂MIM][GLY] کمترین جابه جایی را داشته که نشان از درگیری بالای CAR با آنیون [GLY]⁻ این حلال دارد. ترتیب نتیجه ی SDF و مسیر حرکت CAR یکسان و به صورت زیر است:

$$[PNH_2MIM][GLY] > [POHMIM][GLY] > [PCOOHMIM][GLY] > [PMIM][GLY]$$



نتایج تابع توزیع شعاعی (RDF) بیان می‌کند آنیون نسبت به کاتیون برهم‌کنش شدیدتری با CAR برقرار می‌کند. بنابراین، در تأیید نتایج قبل مشخص می‌شود آنیون نقش تأثیرگذارتری در انحلال CAR دارد. نمودار RDF که در شکل ۳ آمده‌است مشخص می‌کند عامل‌دار کردن کاتیون باعث افزایش شدت برهم‌کنش آنیون-CAR و کاتیون-CAR می‌شود. همچنین نتایج نشان می‌دهد گروه عاملی NH_2 نسبت به دو گروه عاملی دیگر در انحلال CAR موفق‌تر عمل می‌کند.



منابع و مراجع

- [1] Ab Rahim, A. H., Yunus, N. M., Jaffar, Z., Allim, M. F., Zailani, N. Z. O., Fariddudin, S. A. M., Abd Ghani, N., & Umar, M. (2023). Synthesis and characterization of ammonium-based protic ionic liquids for carbon dioxide absorption. *RSC advances*, 13(21), 14268-14280.
- [2] Hoca, M., Becer, E., & Vatansever, H. S. (2023). Carvacrol is potential molecule for diabetes treatment. *Archives of Physiology and Biochemistry*, 1-8.
- [3] Rathod, N. B., Kulawik, P., Ozogul, F., Regenstein, J. M., & Ozogul, Y. (2021). Biological activity of plant-based carvacrol and thymol and their impact on human health and food quality. *Trends in Food Science & Technology*, 116, 733-748.
- [4] Roosta, M., Ghaedi, M., Daneshfar, A., & Sahraei, R. (2015). Ultrasound assisted microextraction-nano material solid phase dispersion for extraction and determination of thymol and carvacrol in pharmaceutical samples: Experimental design methodology. *Journal of Chromatography B*, 975, 34-39.
- [5] Smith, W., & Forester, T. (1996). DL_POLY_2. 0: A general-purpose parallel molecular dynamics simulation package. *Journal of molecular graphics*, 14(3), 136-141.