دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده شیمی

جلسه دفاع دکتری

فرشته شاهنگی

استاد راهنما: دکتر علیرضا نجفی چرمهینی

زمان: **سه شنبه ۷ آذر ساعت ۱۴**

چکیده

در بخش تجربی این رساله، نخست سیلیکای کروی رشته‌ای KCC-1 سنتز شد. از آنجا که سیلیکا ها ساختار شیمیایی نسبتاً خنثایی دارند، قدرت اسیدی آنها کم می‌باشد. بنابراین قدرت اسیدی سیلیکاها به تنهایی برای انجام واکنش آبگیری از کربوهیدرات‌ها کافی نیست. در این راستا اصلاح قدرت اسیدی KCC-1 با گروه پروپیل سولفونیک اسید و آلومینیم انجام شد . سپس ساختار کاتالیست های حاصل با روش های مختلف FT-IR، SEM، HRTEM، BET، XRD، ICP، SEM-EDS و Elemental mapping مورد بررسی قرار گرفت . تصاویر آنالیز میکروسکوپ الکترونی روبشی برای KCC-1 نشان داد که این ماده از کره هایی با اندازه های تقریباً یکسان تشکیل شده است . تصاویر آنالیز میکروسکوپ الکترونی عبو ری نشان داد، KCC-1 ساختاری رشته مانند دارد . همچنین تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری برای سیلیکای اصلاح شده نشان داد که پس از عامل دار شدن نیز ریخت‌شناسی کاتالیست تغییر نکرده است. آنالیز FT-IR اتصال گروه‌های پروپیل سولفونیک اسید به سطح کاتالیست را تایید کرد. نتایج آنالیز BET نشان داد، کاتالیست مساحت سطح بالایی دارد. نحوه توزیع آلومینیم بر روی بستر سیلیکا با کمک نقشه عنصری بررسی شد. الگوی SEM-EDS مربوط به Al-KCC-1، پیک آلومینیم را نشان داد. از کاتالیست‌های حاصل در واکنش آبگیری از کربوهیدرات‌ها و تولید ۵- هیدروکسی متیل فورفورال (HMF) استفاده شد. تأثیر عوامل مختلفی چون دما، زمان، مقدار کاتالیست و حلال بر روی واکنش آبگیری از کربوهیدرات ها بررسی شد . برای واکنش آبگیری از فروکتوز با کاتالیست $KCC-1-Pr-SO_3H$ نتایج قابل قبولی برای بازده (۶۸ ٪) و گزینش پذیری (۶۸ ٪) ۵- هیدروکسی متیل فورفورال در شرایط بهینه (۱۶۲ درجه سانتی گراد و ۳۰ دقیقه) بدست آمد. میزان تبدیل فروکتوز در شرایط بهینه ۹۹ ٪ شد. برای واکنش آبگیری از فروکتوز با کاتالیست Al-KCC-1 (Si/Al = ۵) در شرایط بهینه (۱۶۲ درجه سانتی گراد و ۱ ساعت) بازده و گزینش پذیری HMF به ترتیب۹۲ ٪ و ۹۴ ٪ بدست آمد. میزان تبدیل فروکتوز در شرایط بهینه ۹۸ ٪ شد. برای واکنش آبگیری از گلوکز با کاتالیست Al-KCC-1 (Si/Al = ۴۰) در شرایط بهینه (۱۷۰ درجه سانتی گراد و ۲ ساعت) بازده و گزینش پذیری HMF به ترتیب ۳۹ ٪ و ۴۰ ٪ شد. میزان تبدیل گلوکز در شرایط بهینه ۹۸ ٪ شد. همچنین کاتالیست‌ها قابلیت بازیابی خوبی نشان دادند و پس از چهار بار استفاده مجدد، کاهش قابل توجهی در مقدار بازده HMF مشاهده نشد. در بخش دوم این رساله مطالعه نظری برهمکنش پپتید های حلقوی تشکیل شده از آمینو اسید آلانین با کاتیون‌های فلزات قلیایی خاکی با روش نظریه تابعی چگالی (DFT)/ B3LYP و CAM-B3LYP انجام شد. برای اتم‌ها و عناصر Be^{2+}، Mg^{2+}، Ca^{2+}، H، O، N و C از مجموعه پایه 6-31+G(d) و برای عناصر Sr^{2+} و Ba^{2+} از پتانسیل هسته موثر لوس آلاموس (LANL2DZ) استفاده شد. ترتیب پایداری کمپلکس‌ها به صورت $Be^{2+} > Mg^{2+} > Ca^{2+} > Sr^{2+} > Ba^{2+}$ شد. توانایی پپتیدهای حلقوی برای جدا سازی انانتیومر های آمینو اسید لوسین با روش M062X/DFT و مجموعه پایه 6-31+G(d)، مورد ارزیابی قرار گرفت. در فاز گازی، پپتید حلقوی تشکیل شده از نه آلانین قوی ترین برهمکنش و پپتید حلقوی تشکیل شده از چهار آلانین ضعیف ترین برهمکنش را با انانتیومرهای آمینو اسید لوسین نشان داد. همچنین برهمکنش کپسول پپتیدی متشکل از دو حلقه دارای چهار آمینو اسید آلانین با آنیون‌های فلوئورید، کلرید و برمید ب ا روش (DFT)/ CAM-B3LYP بررسی شد. فلوئورید پایدار ترین کمپلکس و برمید ناپایدار ترین کمپلکس را تشکیل داد.

کلمات کلیدی: آبگیری کربوهیدرات‌ها، ۵- هیدروکسی متیل فورفورال، KCC-1، پپتیدهای حلقوی، CAM-B3LYP، M062X.