تأثیر آنیون در برهم‌کنش مایعات یونی آمینواسیدی بر پایه‌ی ایمیدازولیوم با کارواکرول به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

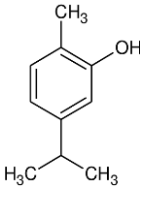
زهرا رضاپور، سید محمدتقی حامدموسویان*، محمد رزمخواه، فاطمه موسوی
دانشگاه فردوسی مشهد، دانشکده مهندسی، گروه مهندسی شیمی، کدپستی ۹۱۷۷۹۴۸۹۴۴
mosavian@um.ac.ir

چکیده

چگونگی برهم‌کنش چهار مایع یونی آمینواسیدی (AAILs) ۱-پروپیل-۳-متیل ایمیدازولیوم آلانینات ([PMIM][ALA])، ۱-پروپیل-۳-متیل ایمیدازولیوم سیستئینات ([PMIM][ALA])، ۱-پروپیل-۳- متیل ایمیدازولیوم گلایسینات ([PMIM][ALA]) و ۱-پروپیل-۳- متیل ایمیدازولیوم سرینات ([PMIM][ALA]) با ترکیب زیست فعال کارواکرول (CAR) به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شد. نتایج پتانسیل نیروی میانگین (PMF) CAR نشان داد بیشترین مقدار انحلال CAR در حلال [PMIM][ALA] و کمترین انحلال متعلق به حلال [PMIM][GLY] است. نتایج حاصل از تابع توزیع فضایی (SDF) حاکی از آن است که چگالی احتمال حضور آنیون در اطراف CAR بسیار بیشتر از چگالی احتمال حضورکاتیون اطراف CAR می‌باشد.

۱- مقدمه

کارواکرول (CAR) با فرمول شیمیایی $C_{۱۰}H_{۱۴}O$ یک مونوترپن فرار فنولی بوده و در گیاهانی مانند آویشن، مرزنجوش، ریحان، پونه‌ی‌کوهی و مرزه وجود دارد [۱]. خواص فراوان CAR باعث شده‌است کاربردهای گسترده‌ای در صنایع مختلف مانند صنایع غذایی، آرایشی و بهداشتی داشته باشد. ساختار، ویژگی‌ها و کاربرد CAR در شکل ۱ آمده‌است. خواص و کاربردهای فراوان CAR باعث اهمیت استخراج آن شده‌است. روش استخراج با حلال یکی از روش‌های معمول استخراج ترکیبات زیستی موجود در گیاهان است که انتخاب حلال مناسب نقش مهمی در روش استخراج دارد. مایعات یونی آمینواسیدی (AAILs) که جزء حلال‌های سبز به شمار می‌روند دارای خواص منحصربه‌فردی نظیر فشاربخار کم، قدرت انحلال بالا، پایداری گرمایی و شیمیایی بالا هستند [۲, ۳]. به همین دلیل در این پژوهش از AAILs به عنوان حلال سبز استفاده شده‌است.

کاربرد	خواص	ساختار
صنایع غذایی:	ضد سرطان	
ادویه و نگهدارنده	ضد باکتری	
صنایع بهداشتی:	ضد اسپاسم	
ماده‌ی معطر و دهان‌شویه	محافظ قلب و کبد	
صنایع آرایشی:	آنتی اکسیدان	
ممانعت کننده‌ی اکسیداسیون چربی	آنتی بیوتیک	

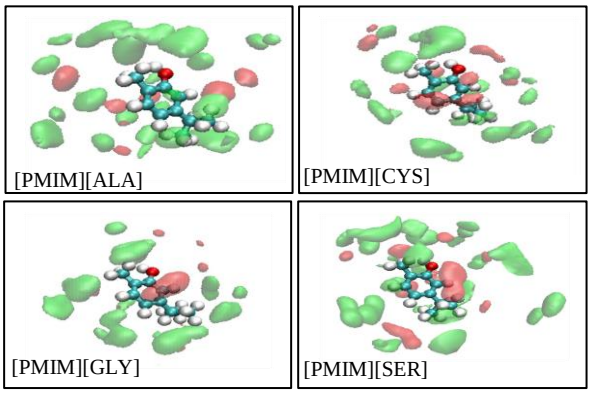
شکل ۱- ساختار، ویژگی‌ها و کاربرد CAR [۱, ۴, ۵]

۲- روش و جزئیات شبیه‌سازی

در سطح محاسباتی B3LPY/6-311++(d,p) بهینه‌سازی گونه‌ها انجام و بارهای اتمی جزئی با روش NBO محاسبه شد. ۲۱۶ جفت یون و ۴ مولکول CAR در جعبه‌ی شبیه‌سازی مکعبی در نرم‌افزار دی-ال پلی نسخه‌ی ۲/۱۸ [۶] تکرار و از میدان نیروی AMBER [۷] استفاده شده‌است. شعاع قطع ۱۸ Å و گام زمانی ۱ fs بوده و شبیه‌سازی به مدت ۳۵ ns در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm انجام شد.

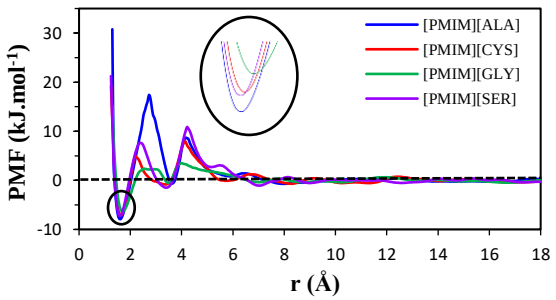
۳- بحث و نتیجه‌گیری

مطابق با آنالیز تابع توزیع فضایی (SDF) مشخص شد چگالی احتمال حضور آنیون (ابر سبز رنگ) در اطراف CAR (به عنوان گونه‌ی مرجع) بسیار بیشتر از چگالی احتمال حضور کاتیون (ابر قرمز رنگ) در اطراف CAR می‌باشد. این مشاهده تأیید می‌کند بیشترین احتمال حضور آنیون در سمت گروه هیدروکسیل CAR می‌باشد. شکل ۲ نمایی از SDF را نمایش می‌دهد.



شکل ۲- SDF آنیون (سبز) و کاتیون (قرمز) اطراف CAR در AAILs

مقدار پتانسیل نیروی میانگین (PMF) برای CAR محاسبه شد و نتایج نشان داد بیشترین میزان انرژی انحلال CAR متعلق به حلال [PMIM][ALA] و کمترین مربوط به [PMIM][GLY] می‌باشد. بنابراین، نتیجه می‌شود CAR حل شده به واسطه‌ی آنیون $^{-}$[ALA] به سختی رها می‌شود که حاکی از انحلال بیشتر CAR توسط آلانینات است. ترتیب PMF محاسبه شده به صورت [PMIM][ALA] > [PMIM][SER] > [PMIM][CYS] > [PMIM][GLY] می‌باشد. شکل ۳ نمودار PMF را نشان می‌دهد.



شکل ۳- نمودار PMF برای CAR

۴- نتایج

بررسی‌های حاصل از SDF و PMF نشان داد آنیون آلانینات در مقایسه با آنیون‌های دیگر در انحلال CAR بیشترین تأثیرگذاری را داشته و موفق‌تر عمل کرده‌است.

تشکر و قدردانی

از دانشگاه فردوسی مشهد جهت حمایت‌های مادی و معنوی در راستای به نتیجه رسیدن این پژوهش نهایت تشکر را داریم.

مراجع

[۱] N. B. Rathod, P. Kulawik, F. Ozogul, J. M. Regenstein, and Y. Ozogul, "Biological activity of plant-based carvacrol and thymol and their impact on human health and food quality," T rends in Food Science & Technology, vol. 116, pp. 733-748, 2021.

[۲] A. H. Ab Rahim, N. M. Yunus, Z. Jaffar, M. F. Allim, N. Z. O. Zailani, S. A. M. Fariddudin, N. Abd Ghani, and M. Umar, "Synthesis and characterization of ammonium-based protic ionic liquids for carbon dioxide absorption," RSC Advances, vol. 13, no. 21, pp. 14268-14280, 2023.

[۳] R. Hassan, F. Nazir, M. Roosh, A. Qaisar, U. Habib, A. A. Sajini, and M. Iqbal, "Synthesis, Characterization, Biological Evaluation, and In Silico Studies of Imidazolium-, Pyridinium-, and Ammonium-Based Ionic Liquids Containing n-Butyl Side Chains," Molecules, vol. 27, no. 19, p. 6650, 2022.

[۴] M. Hoca, E. Becer, and H. S. Vatansever, "Carvacrol is potential molecule for diabetes treatment," Archives of Physiology and Biochemistry, pp. 1-8, 2023.

[۵] M. S. Foote, K. Du, S. Mousavi, S. Bereswill, and M. M. Heimesaat, "Therapeutic oral application of carvacrol alleviates acute campylobacteriosis in mice harboring a human gut microbiota," Biomolecules, vol. 13, no. 2, p. 320, 2023.

[۶] W. Smith and T. Forester, "DL_POLY_2. 0: A general-purpose parallel molecular dynamics simulation package," Journal of Molecular Graphics, vol. 14, no. 3, pp. 136-141, 1996.

[۷] T. Fox and P. A. Kollman, "Application of the RESP methodology in the parametrization of organic solvents," The Journal of Physical Chemistry B, vol. 102, no. 41, pp. 8070-8079, 1998.