



پایان نامه کارشناسی ارشد در رشته‌ی شیمی - شیمی فیزیک

مطالعه تئوری اثر استخلاف برخی از فلزات واسطه
بر روی پتانسیل کاهش دو الکترونی کینون ها

به وسیله‌ی

سعیده شریعتی جور

استاد راهنما

دکتر علی حیدر پاکبازی

شهریور ۱۳۹۰

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

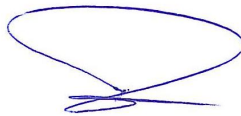
به نام خدا

اظہار نامہ

اینجانب سعیدہ شریعتی جور دانشجوی رشته ی شیمی گرایش شیمی فیزیک دانشکده ی علوم اظہار می کنم کہ این پایان نامہ حاصل پژوهش خودم بوده و در جاهایی کہ از منابع دیگران استفادہ کردہ ام، نشانی دقیق و مشخصات کامل آن را نوشتہ ام. همچنین اظہار می کنم کہ تحقیق و موضوع پایان نامہ ام تکراری نیست و تعہد می نمایم کہ بدون مجوز دانشگاه دستاوردهای آن را منتشر ننمودہ و یا در اختیار غیر قرار ندم. کلیہ حقوق این اثر مطابق با آیین نامہ مالکیت فکری و معنوی متعلق بہ دانشگاه شیراز است.

نام و نام خانوادگی: سعیدہ شریعتی جور

تاریخ و امضا: ۱۳۹۰/۸/۱۴



به نام خدا

مطالعه تئوری اثر استخلاف برخی از فلزات واسطه بر روی
پتانسیل کاهشی دو الکترونی کینون ها

به کوشش
سعیده شریعتی جور

پایان نامه
ارائه شده به معاونت تحصیلات تکمیلی به عنوان بخشی
از فعالیت های لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته ی
شیمی فیزیک

از دانشگاه شیراز
شیراز
جمهوری اسلامی ایران

ارزیابی شده توسط کمیته ی پایان نامه با درجه : عالی

..... دکتر علی حیدر پاکبازی، استاد بخش شیمی (رئیس کمیته و استاد راهنما).
..... دکتر افشان مهاجری، دانشیار بخش شیمی
..... دکتر حسین موسوی پور، استاد بخش شیمی

شهریور ۱۳۹۰

تقدیم به

مادر مهربانم

و

خواهر عزیزم سیما که حقیقتاً بری من بیشتر از یک
خواهر است.

سپاسگزاری

حمد و سپاس خداوند متعال را که یاریم نمود تا پایان نامه ام را به پایان برسانم. از تمام کسانی که مرا در به اتمام رساندن این پژوهش یاری کرده اند تشکر و قدردانی می‌نمایم، بخصوص از استاد راهنمای ارجمندم جناب آقای دکتر پاکباز که از راهنمایی‌های ایشان نه تنها در مباحث علمی بلکه در تمام ابعاد زندگی بهره‌مند گشتم، نهایت سپاسگزاری را دارم.

چکیده

مطالعه تئوری اثر استخلاف برخی از فلزات واسطه بر روی پتانسیل کاهش دو الکترونی کینون ها

به کوشش

سعیده شریعتی جور

در این پایان نامه، اثر استخلاف شدن فلزات مس، نقره و طلا بر روی پتانسیل کاهش دو الکترونی کینون ها مورد مطالعه قرار گرفت. تمام ساختارها (۱۲۵ فرم اکسید) با استفاده از روش B3lyp بهینه شدند. از توابع پایه LANL2DZ برای فلزات و از $6-31+G^{**}$ برای سایر اتم ها استفاده گردید. تست فرکانس برای تایید عدم فرکانس منفی و جهت بدست آوردن انرژی آزاد گیبس ترکیبات انجام شد. در اینجا نشان داده می شود که استخلاف شدن فلزات نامبرده باعث کاهش پتانسیل دو الکترونی کینون ها می شود. با استخلاف کردن این فلزات به همراه گروههای عاملی دیگر نظیر $-NO_2$, $-OH$, $-CH_3$, $-Cl$, $-COOH$ طیف وسیع تری از پتانسیل کاهش کینون ها بدست می آید. برای بررسی عمومیت اثر این فلزات بر روی پتانسیل کاهش خانواده کینون ها، محاسبات مشابهی بر روی کینون ها با حلقه های جوش خورده (نفتوکینون و مشتقی از آنتراکینون) انجام گرفت و نتایج مشابهی نیز بدست آمد. در آخرین قسمت از این تحقیق اثر کلاسترهای مس بر روی پتانسیل کاهش دو الکترونی بنزوکینون مورد مطالعه قرار گرفت و با استفاده از این کلاسترهای فلزی به همراه گروه هیدروکسیل مقدار پتانسیل تا 72.43% نسبت به بنزوکینون استخلاف نشده، کاهش یافت.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	فصل اول: مقدمه
۳	۱-۱ انتقال الکترون.....
۳	۲-۱ کینون: یک نام برای یک گروه از ترکیبات.....
۳	۳-۱ کاربرد کینون ها.....
۴	۱-۳-۱ به عنوان واکنشگر در شیمی آلی
۴	۲-۳-۱ فعالیت های بیولوژیکی و استفاده های دارویی
۴	۳-۳-۱ کاربرد در سنسورها.....
۴	۱-۳-۳-۱ کاربرد در سنسور گلوکز
۵	۲-۳-۳-۱ کاربرد در بیوسنسور تیروسیناز.....
۵	۳-۳-۳-۱ کاربرد سنسور DNA.....
۶	۴-۳-۳-۱ کاربرد در سنسور HPR
۶	۴-۱ خلاصه ای از تحقیق حاضر.....

فصل دوم: تاریخچه محاسباتی

۸	تاریخچه محاسباتی
---	------------------------

فصل سوم: درآمدی بر روش های محاسباتی

۱۲	۱-۳ تئوری DFT.....
۱۲	۱-۱-۳ تئوری های هوهنبرگ-کان
۱۳	۲-۱-۳ روش کان - شام
۱۵	۲-۳ LANL2D2
۱۵	۳-۳ توابع پایه
۱۸	۴-۳ تئوری کوانتومی اتم در مولکول

۱-۴-۳ دانسیته الکترون در تئوری اتم در مولکول	۱۸
۲-۴-۳ انرژی در تئوری اتم در مولکول	۱۹
۵-۳ اربیتال های پیوندی طبیعی	۱۹
۶-۳ جزئیات محاسبات در این تحقیق:.....	۲۰

فصل چهارم: بحث و نتیجه گیری

۱-۴ نام گذاری	۲۳
۲-۴ قسمت A: پتانسیل کاهش دو الکترونی بنزوکینون ها.....	۲۴
۳-۴ ارتباطات	۳۲
۴-۴ قسمت B : عمومیت دادن روندهای بالا برای حلقه های کینون جوش خورده	۳۵
۱-۴-۴ پتانسیل کاهش دو الکترونی مشتقات یک فلزی نفتوکینون	۳۶
۲-۴-۴ اثر استخلاف فلزات واسطه بر روی پتانسیل کاهش دو الکترونی آنترا کینون ۲ - کربوکسیلیک اسید	۳۶
۵-۴ قسمت C : اثر کلاسترهای مس بر روی پتانسیل کاهش دو الکترونی کینون	۳۷
نتیجه گیری	۳۸

فهرست منابع و مآخذ	۳۹
--------------------------	----

فهرست جدول ها

عنوان	صفحه
جدول ۱ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکولهای نوع دو (بر حسب ولت).....	۲۶
جدول ۲ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکولهای نوع سه (بر حسب ولت).....	۲۷
جدول ۳ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکولهای نوع چهارم (بر حسب ولت).....	۲۸
جدول ۴ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکولهای نوع پنجم (بر حسب ولت).....	۲۹
جدول ۵ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکولهای نوع ششم (بر حسب ولت).....	۳۰
جدول ۶ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکولهای نوع هفتم (بر حسب ولت).....	۳۱
جدول ۷ مقادیر تجربی مربوط به برخی خواص فلز.....	۳۲
جدول ۸ مقادیر R^2 مربوط به ارتباط خطی بین مقادیر پتانسیل مولکول های نوع چهارم و خواص تجربی فلز.....	۳۳
جدول ۹ مقادیر R^2 مربوط به ارتباط خطی بین مقادیر پتانسیل مولکول های نوع پنجم و خواص تجربی فلز.....	۳۴
جدول ۱۰ پتانسیل کاهش دو الکترونی مشتقات یک فلزی نفتوکینون (بر حسب ولت).....	۳۶
جدول ۱۱ مقادیر R^2 مربوط به ارتباط خطی بین مقادیر پتانسیل ترکیبات نفتوکینون و خواص تجربی فلز.....	۳۶
جدول ۱۲ پتانسیل کاهش دو الکترونی بنزوکینون استخلاف شده توسط کلاستر های مس (بر حسب ولت).....	۳۷

فهرست نمودارها

صفحه	عنوان
۲۵	نمودار ۱ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکول های نوع دو.....
۲۶	نمودار ۲ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکول های نوع دو.....
۲۸	نمودار ۳ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکول های نوع سه.....
۲۹	نمودار ۴ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکول های نوع چهارم.....
۳۰	نمودار ۵ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکول های نوع پنجم.....
۳۱	نمودار ۶ پتانسیل کاهش دو الکترونی مولکول های نوع ششم.....
	نمودار ۷ ارتباط خطی بین مقادیر پتانسیل مولکول های نوع هفتم
۳۴	و مجموع EMF های فلزات.....
	نمودار ۸ ارتباط خطی بین مقادیر پتانسیل مولکول های نوع هفتم و مجموع الکترون
۳۴	خواهی های فلزات.....
	نمودار ۹ ارتباط خطی بین مقادیر پتانسیل مولکول های نوع هفتم و مجموع
۳۵	الکترونگاتیوی های فلزات.....
۳۸	نمودار ۱۰ پتانسیل کاهش دو الکترونی مشتقات کلاستری و غیر کلاستری مس.....

فصل اول

مقدمه

شیمی محاسباتی شاخه ای از شیمی است که از اصول علم کامپیوتر برای مسائل شیمی استفاده می کند. در این شاخه با استفاده از نتایج تئوری و وارد کردن آن ها در برنامه های کامپیوتری، ساختار و خواص مولکولی محاسبه می شود. نتایج مربوط به مسئله کوانتومی چند ذره ای اطلاعات مشاهده شده توسط آزمایش و تجربه را کامل می کند و در مواردی می تواند خواص شیمیایی که تا به حال مشاهده نشده را پیشگویی کند. نمونه ای از این خواص شامل ساختار، انرژی های مطلق و نسبی، توزیع بار الکترونی، ممان دو قطبی و چند قطبی، فرکانس های ارتعاشی، واکنش پذیری و دیگر کمیت های طیف سنجی می باشد. همچنین از آن در طراحی داروها و مواد جدید استفاده می کنند. در تمام موارد زمان محاسبات کامپیوتری با افزایش سایز مولکول افزایش می یابد. سیستم می تواند یک مولکول تک یا یک گروه از مولکول ها باشد.

روش های شیمی محاسباتی می تواند در گستره خیلی دقیق تا با تقریب زیاد قرار گیرند. روش های خیلی دقیق برای مولکول های کوچک قابل استفاده اند. منظور از واژه شیمی تئوری توصیف ریاضی وار شیمی است در صورتی که واژه شیمی محاسباتی زمانی به کار می رود که روشهای ریاضی برای انجام محاسبات کامپیوتری استفاده شود. هدف شیمی محاسباتی می تواند به طور کلی در دو مورد زیر خلاصه شود :

- می تواند راهی برای یافتن نقطه آغاز یک سنتز شیمیایی باشد و یا برای تحلیل داده های تجربی به کار رود.
- می تواند برای طراحی و توصیف مولکول های ناشناخته و یا تعیین مکانیسم واکنشهایی که پیگیری آنها به طریق تجربی مشکل است، به کار گرفته شود.

۱-۱- انتقال الکترون

انتقال الکترون (ET) پروسه ای است که در آن الکترون از یک اتم یا گونه شیمیایی به اتم یا گونه شیمیایی دیگر منتقل می شود. ET یک مفهوم مکانیکی از مفهوم ترمودینامیکی اکسایش و کاهش است. انتقال الکترون یکی از پروسه های مهم در سیستم های حیاتی است [۱]. پروسه های بیولوژیکی متعددی شامل واکنش های ET است. اندازه گیری تجربی توانایی انتقال الکترون پتانسیل اکسایشی کاهش یافته می شود. پتانسیل اکسایشی کاهش یافته مطلق بسیاری از مولکول ها اندازه گیری شده است. در هر حال اندازه گیری تجربی پتانسیل اکسایشی کاهش یافته با سختی هایی همراه است. پیشگویی تئوری پتانسیل کاهش یافته بر مبنای روش های کوانتوم مکانیکی یکی از مباحث مورد توجه در سال های اخیر بوده است [۲]. محاسبه دقیق پتانسیل الکترون در جاهای زیادی سودمند است از جمله در تعیین مکانیسم واکنش های الکتروشیمیایی و طراحی مولکول هایی با خواص اکسایشی ویژه [۳ و ۴].

۱-۲- کینون: یک نام برای یک گروه از ترکیبات

کینون ها دسته ای از ترکیبات آلی هستند که از ترکیبات آروماتیکی نظیر بنزن یا نفتالن، با جایگزینی تعداد زوج از گروه های $-CH=$ با $-C(=O)-$ تشکیل میشوند. معروف ترین عضو این خانواده مولکول ۱ و ۴- بنزوکینون است که اغلب به آن کینون گفته می شود. اعضای مهم دیگر این گروه شامل ۱ و ۴- نفتوکینون و ۹ و ۱۰- آنتراکینون هستند. ترم کینون همچنین به طور عمومی برای مشتقات دیگر این ترکیبات که دارای گروه های دیگری به جای هیدروژن هستند به کار می رود.

۱-۳- کاربرد کینون ها

کینون ها دارای اهمیت زیادی در شیمی و بیوشیمی هستند و فعالیت بیولوژیکی آنها عموماً به پتانسیل اکسایش آنها وابسته است [۵-۹]. با تغییر ساختار کینون ها می توان به ناحیه پتانسیل مطلوب دست یافت [۱۰]. بنابراین مطالعه بر روی پتانسیل اکسایش ساختارهای متفاوت از این ترکیبات و بدست آوردن ناحیه پتانسیل مورد نیاز برای استفاده در کارهای مختلف حائز اهمیت است. بعضی از کاربردهای این دسته از ترکیبات به شرح زیر است.

۱-۳-۱- به عنوان واکنشگر در شیمی آلی

بنزوکینون در شیمی آلی به عنوان یک ماده اکسید کننده به کار گرفته می شود. مواد اکسید کننده قوی تر از مشتقات کینون وجود دارد مثل کلرانیل یا DDQ [۱۱].

۱-۳-۲- فعالیت های بیولوژیکی و استفاده های دارویی

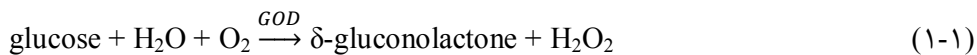
کینون های طبیعی یا سنتز شده فعالیت بیولوژیکی و فارماکولوژی از خود نشان می دهند و تعدادی از آن ها خواص ضد سرطان دارند. به عنوان مثال میتوکسانترون یک آمینوآنتراکینون است که به عنوان یک داروی ضد سرطان شناخته شده است [۱۲]. این دارو بخصوص در درمان سرطان خون و سرطان سینه کاربرد دارد [۱۳]. مثال دیگر β - لاپاکن است که به راحتی از لاپاکن و لوماتیول سنتز می شود [۱۶]. این دارو دارای خواص بیولوژیکی وسیعی می باشد از جمله فعالیت ضد سرطان [۱۷-۱۸]. مکانیسم عمل و خواص آن به توانایی اکسایش و کاهش آن ها بستگی دارد [۱۹]. کوآنزیم Q₁₀ یک ماده شبه ویتامین و قابل حل در چربی است که در بیشتر سلول های حیاتی و در میتوکندری وجود دارد و باعث ایجاد انرژی به فرم ATP می باشد. ۹۵٪ انرژی مورد نیاز انسان از این طریق ایجاد می شود [۲۰-۲۱]. این کوآنزیم همچنین دارای خواص ضد سرطان است [۲۲] و به عنوان آنتی اکسیدان نیز کاربرد دارد [۲۳].

۱-۳-۳- کاربرد در سنسورها

کینون ها در سنسورها و بخصوص بیوسنسورها به عنوان حد واسط و تبدیل کننده انرژی کاربرد دارد. استفاده از آن ها در سنسورها به خواص اکسایشی آن ها وابسته است.

۱-۳-۳-۱- کاربرد در سنسور گلوکز

پلیمرهای دارای خواص اکسایشی مثل پلی آنیلین، پلی استیلن و پلی فنیلین دارای کاربرد در باتری های قابل شارژ مجدد، سنسورها و الکتروکاتالیزورها هستند [۲۴-۲۶]. پلیمرهای اکسایشی شامل کینون به خاطر خاصیت اکسایشی دو الکترونی آن ها بسیار مورد توجه هستند [۲۷-۳۲]. گلوکز اکسیداز یک سنسور بسیار مورد توجه تاکنون بوده است [۳۳]. واکنش در این سنسور به صورت معادله ی (۱-۱) است.



غلظت نمونه گلوکز چه با محاسبه ی مصرف اکسیژن و چه با محاسبه تولید هیدروژن پراکسید قابل اندازه گیری است. اگر سنسور بر مبنای اندازه گیری اکسیژن باشد مزاحمت اکسیژن محیط باعث سختی در کار می شود. بنابراین اندازه گیری از طریق H₂O₂ ترجیح داده می شود، اما این روش هم مشکلاتی به همراه دارد از جمله اینکه بسیاری از گونه ها در

پتانسیلی کمتر از پتانسیل لازم برای H_2O_2 اکسید می شوند مثل آسکوربیک اسید و یوریک اسید. از طرف دیگر H_2O_2 به سنسور GOP صدمه وارد می کند و فعالیت آن را محدود می کند. بسیاری از این محدودیت ها را می توان با به کار گرفتن یک گونه ی حدواسط فعال اکسایشی که جایگزین اکسیژن شود برطرف کرد. بنزوکینون و مشتقات کینون به عنوان یکی از مهمترین حدواسط ها کاربرد دارند و بنزوکینون به صورت ویژه برای استفاده در سنسور GOD مناسب می باشد [۳۴-۳۸].

پلی هیدروکینون (PHQ) یک پلیمر اکسایش پایدار است که می تواند به عنوان حدواسط در سنسور گلوکز مورد استفاده قرار گیرد. در مقایسه با دیگر پلیمرهایی که شامل کینون هستند پلی هیدروکینون دارای مزیت بیشتری است از جمله فعالیت الکتروشیمیایی بیشتر و برگشت پذیری و عملکرد بهتر برای استفاده در سنسور گلوکز [۳۹].

۱-۳-۲ کاربرد در بیوسنسور تیروسیناز

بیوسنسور تیروسیناز برای آشکار سازی و اندازه گیری مقدار بسیار کم فنول ها کاربرد دارد. ترکیبات فنولی ترکیبات سمی در آب های زیرزمینی و آب های سطحی هستند [۴۰]. کالری متری و طیف سنجی فرابنفش از روش های معمول و استاندارد برای اندازه گیری فنول ها می باشد [۴۱-۴۲]. این پروسه ها معمولاً زمان بر هستند و آماده سازی نمونه در آن ها پیچیده است و دارای حساسیت کم می باشد.

تیروسیناز، همچنین به عنوان پلی فنل اکسیداز شناخته شده که شامل دو سایت فلز مس است [۴۴]، که یک سایت آن به ترکیبات آروماتیک تمایل دارد (سایت ماده) و یک سایت دیگر به مواد فلز دوست تمایل دارد (سایت اکسیژن). این ماده باعث کاتالیز شدن دو واکنش می شود: ارتوهیدروکسیل شدن فنول ها برای ایجاد کتکول و اکسید شدن کتکول به ارتوکینون با مصرف اکسیژن مولکولی گونه های کینون جدید می توانند در پتانسیل کم و بدون هیچ حدواسطی به صورت الکتروشیمیایی به مواد فنولی کاهش یابند.

بنابراین فنول ها می توانند با مصرف اکسیژن اندازه گیری و آشکار سازی شوند [۴۴-۴۵] و یا با کاهش الکتروشیمیایی گونه های کینونی [۴۶-۵۱]. بخصوص روش دوم دارای مزیت بیشتری می باشد و سیگنال بهتری می دهد. پاسخ (سیگنال) بهتر زمانی مشاهده می شود که ارتوکینون با استفاده از یک پلیمر فعال کاتالیزوری [۴۴-۵۲] و یا حد واسط های مناسب اکسایشی [۵۳-۵۸] کاهش می یابد.

۱-۳-۳ کاربرد سنسور DNA

سنسورهای DNA بسیار مورد توجه هستند. در حال حاضر سیستم های آشکار ساز نیازمند به استفاده از فلورسنت و یا کمیلومینوسنس هستند [۶۱-۵۹] و یا حتی رزونانس پلاسمایی [۶۳-۶۲].

[۶۲]. این روش ها علی رغم استفاده زیاد و حساسیت بالا بسیار طولانی و گران قیمت هستند، به همین دلیل توجه زیادی بر بیوسنسورهای الکتروشیمیایی متمرکز است [۶۳-۷۸] زیرا که آشکار سازهای الکتروشیمیایی نیازمند زمان و دستگاه های کمتری هستند. بیوسنسورهای الکتروشیمیایی برای هیبرید شدن DNA بسیار مورد توجه هستند. نکته کلیدی در استفاده از آن ها مشاهده سیگنال قوی برای غلظت کم DNA است.

الکترودهای بر مبنای پلیمرهای هادی باعث تضعیف سیگنال در طول هیبرید شدن می شوند (رفتار سیگنال خاموش). برای برطرف کردن این مشکل سنسورهای بر پایه ی پلیمرهای الکترونیکی (ECP) طراحی شده اند که رفتار "سیگنال روشن" دارند و در آنها از گروه کینون ها به عنوان مواد آشکار ساز استفاده شده است [۷۹].

۱-۳-۳-۴ کاربرد در سنسور HPR

الکتروده HPR یکی از پرکاربرد ترین شناساگرها برای اندازه گیری مقدار هیدروژن پراکسید (H_2O_2) و ترکیبات آلی هیدروپراکسید می باشد [۸۰]. فعالیت خوب این الکتروده به سرعت انتقال سریع الکترون بین سطح الکتروده و مرکز اکسایش پراکسیداز بستگی دارد. آنتراکینون ۲-کربوکسیلیک اسید به عنوان یک حد واسط و گونه ی انتقال الکترون خوب در الکتروده HPR کاربرد دارد. نتایج ولتامتری چرخشی نشان می دهد که این مولکول قادر است الکترون ها را بین قسمت هم (heme) از الکتروده HRR و الکتروده کربن شیشه منتقل کند.

۱-۴- خلاصه ای از تحقیق حاضر

در این تحقیق ما اثر سه فلز واسطه مس، نقره و طلا را بر روی پتانسیل کاهش دو الکترونی کینون ها مورد بررسی قرار دادیم. ۱۲۵ گونه در اینجا بررسی گردید. پتانسیل ها به صورت تئوری و با استفاده از تئوری DFT محاسبه شدند. ما یک روند را برای مقادیر پتانسیل ترکیبات بدست آوردیم. همچنین ما ارتباط بین مقادیر پتانسیل کاهش دو الکترونی ترکیبات و برخی خواص تجربی فلز مثل نیروی الکتروموتیو، الکترون خواهی و الکترون گاتیوی فلز بررسی کردیم. اگر چه بیشترین تمرکز ما بر روی بنزوکینون و مشتقات آن قرار داشت اما ما پتانسیل کاهش دو الکترونی نفتوکینون و آنتراکینون را نیز محاسبه کردیم تا عمومیت اثر این فلزات بر خانواده کینون ها را بررسی کنیم.

ارتباط بین مقادیر پتانسیل و خواص تجربی فلز برای این دسته از ترکیبات نیز چک گردید. و در قسمت آخر ما اثر کلاسترهای مس را بر روی پتانسیل کاهش دو الکترونی بنزوکینون و مشتقات آن مورد مطالعه قرار دادیم.

فصل دوم

تاریخچه محاسباتی

تاریخچه محاسباتی

محاسبات تئوری پتانسیل الکتروود بسیاری از مولکول ها در فاز محلول انجام شده است [۸۴]- [۸۱]. نمازیان و همکاران پتانسیل کاهش تعدادی از مشتقات کینون را به صورت تئوری محاسبه کردند. آن ها پتانسیل الکتروود تعدادی از کینون ها، بنزوکینون و آنتراکینون را در محلول غیرآبی استونیتریل و با استفاده از روش ها و تری-فاک (HF) محاسبه کردند [۸۵]. آن ها همچنین از روش DFT در سطح B3LYP و توابع پایه 6-31(d,p) استفاده نمودند و از مدل پیوسته قطبش پذیر CPCM برای در نظر گرفتن اثر حلال استفاده کردند. آن ها متوجه شدند که روش DFT روش بهتری نسبت به روش هادتری فاک برای انجام محاسبات بخصوص برای آنتراکینون هاست و بنابراین برای مولکول های بزرگ تر مناسب تر است. آن ها دریافتند که روش DFT برای سیستم های بزرگ دارای الکترون های غیرمستقر π مثل آنتراکینون بهتر است.

در گزارش بعدی آنها پتانسیل کاهش تعدادی از کینون ها را در محلول آبی محاسبه کردند. آن ها یک مجموعه از مشتقات کینون را که پتانسیل آن ها توسط زپا و سوند [۸۸] و رینولد و همکاران [۸۹] محاسبه شده بود در نظر گرفتند. پتانسیل الکتروود تجربی این مولکول ها بین گستره ۰/۴۷۰-۰/۷۹۲ ولت بود. این مولکول ها شامل شش بنزوکینون و دو نفتوکینون با استخلاف های -OH, -CH₃, -Cl در موقعیت های مختلف حلقه بودند. این محاسبات با استفاده از سطح B3LYP و توابع پایه 6-31+6** انجام داده شد.

آن ها از مدل پیوسته قطبش پذیر PCM برای بدست آوردن انرژی ها در فاز محلول استفاده نمودند [۹۰-۹۲]. آن ها متوجه یک تفاوت کم بین مقادیر محاسبه شده و مقادیر تجربی شدند و به این نتیجه رسیدند که پتانسیل کاهش مشتقات کینون را با استفاده از این روش ها می تواند با حداکثر خطای ۰/۰۸۷ \pm ولت و خطای متوسط ۰/۰۴۳ ولت محاسبه کرد. در مطالعات بعدی نمازیان و همکاران مطالعات قبلی خود را با به کار بردن یک مدل جدید برای حلالیت بسط دادند [۹۵]. وارد کردن انرژی آسایش نتایج را تقویت کرد زیرا آنها اجازه دادند هندسه مولکول زمانی که از فاز گاز به فاز محلول می رود آسایش یابد. پتانسیل الکتروود