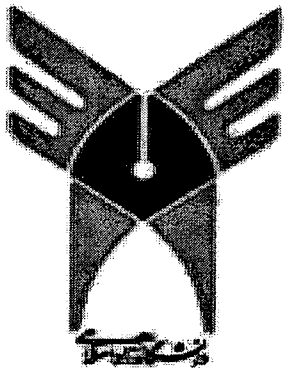
١٥٨٠٨٢



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد«M.Sc»

گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی ساختاری کنفورمرهای مختلف تری پپتید محافظت شده

$HCO\text{-}Gly\text{-}L\text{-}ILeu\text{-}Gly\text{-}NH_2$ در فاز گازی با استفاده از محاسبات کوانتومی

استاد راهنما:

دکتر بهزاد چهکندی

استاد مشاور:

دکتر جعفر ابولی

نگارش:

بنت الهدا اشرفی

تابستان ۱۳۸۹

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
پژوهشگاه علوم و فناوری اطلاعات ایران
IRANDOC
مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران

۱۵۸۰۸۲

۳۳۹۰/۳/ ۸

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد « M.Sc. »

گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی ساختاری کنفورمرهای مختلف تری پپتید محافظت شده

$HCO\text{-}Gly\text{-}L\text{-}ILE\text{-}Gly\text{-}NH_2$ در فاز گازی با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتومی

نگارش:

بنت الهدا اشرفی

تابستان ۱۳۸۹

هیأت داوران :

۱. دکتر بهزاد چهکندی

۲. دکتر جعفر ابولی

۳. دکتر احسان زاهدی

٤. دکتر فرامرز طیاری

خداوندا

توفیقت را شامل حال ما فرما تا با صدق نیت به بندگی تو قیام کنیم

و

زندگانی خود را در این دنیای رو به زوال بیهوده استهلاک ننماییم.

شوق آموختن را آموزگار خوب برمی‌انگیزد و با این شوق چراغی در دل شاگردان روشن می‌شود که راهنمای راهشان خواهد بود.

سپاس فراوان از

استاد بزرگوار" جناب آقای دکتر بهزاد چهکندی"

برای تمام راهنماییها و پشتیبانیهایشان

و

استاد بزرگوار "جناب آقای دکتر جعفر ابولی"

برای رهنمودهایشان در این مسیر

تقدیم به

تمام آنان که به من آموخته‌اند و به راه ورسم بودن وزیستن رهنمونم کردند.

و

تقدیم به

پدرم

مشوق مهربان وهمیشگی در علم ودانش

مادرم

اولین وبهترین معلم در طول زندگی خواهرم

همراه لحظه های تلخ و شیرین

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
چکیده	۱
فصل اول: ساختار پروتئین	
۱-۱-مقدمه	۳
۱-۲- ترکیب بدن انسان	۳
۱-۳- زیست مولکولها و زیست بسپارها	۳
۱-۴- قدمت اسیدهای آمینه	۴
۱-۵- ساختار اسیدهای آمینه	۵
۱-۶- اسیدهای آمینه استاندارد	۶
۱-۷- اسیدهای‌آمینه غیراستاندارد	۷
ا-۸- اسیدهای‌آمینه ضروری	۸
۱-۹- اسیدهای‌آمینه غیر ضروری	۸
۱-۱۰- اهمیت زیست- پزشکی اسیدهای آمینه	۸
۱-۱۱- تهیه اسیدهای آمینه	۹
۱-۱۱-۱- آمیندار کردن α- هالواسیدها	۹
۱-۱۱-۱-۱- روش هل – ولهارد – زلینسکی	۹
۱-۱۱-۱-۲- روش مالونیک استر	۱۰
۱-۱۲- ایزومری در اسیدهای آمینه	۱۰
۱-۱۳- بارالکتریکی اسیدهای آمینه	۱۱
۱-۱۴- ثابت تفکیک اسیدهای آمینه	۱۲
۱-۱۴-۱- رابطه ثابت تفکیک (pK) با عوامل جانبی	۱۲

۱-۱۵- نقطه ایزوالکتریک ۱۳

۱-۱۶- حلالیت ونقطه ذوب اسیدهای‌آمینه ۱۴

۱-۱۷- اهمیت ریشه‌های کربنی جانبی (R) ۱۵

۱-۱۷-۱- گروه های R آلیفاتیک و غیرقطبی ۱۵

۱-۱۷-۲- گروه های R آروماتیک ۱۶

۱-۱۷-۳- گروه های R قطبی و بدون بار ۱۷

۱-۱۷-۴- گروه های R بازی(با بار مثبت) ۱۹

۱-۱۷-۵- گروه های R اسیدی (با بار منفی) ۲۰

۱-۱۸- واکنشهای شیمیایی مهم اسیدهای آمینه ۲۱

۱-۱۹- پپتیدها ۲۲

۱-۲۰- اهمیت زیست – پزشکی پپتیدها ۲۳

۱-۲۱- پیوندهای پپتیدی ۲۳

۱-۲۲- ساختمان اولیه پلی پپتیدها ۲۳

۱-۲۳- بار الکتریکی مؤثر پپتیدها ۲۴

۱-۲۴- استحکام پیوندهای پپتیدی ۲۴

۱-۲۵- پیوندهای غیر کووالان ۲۵

۱-۲۶- روشهای مطالعه ساختار اولیه ۲۵

۱-۲۷- ساختار دوم پروتئینها ۲۶

۱-۲۷-۱-ساختار چیندار ۲۶

۱-۲۷-۲- ساختار مارپیچی ۲۶

۱-۲۸- پیوندهای ضعیف ۲۷

۱-۲۸-۱- پیوندهای ضعیف دارای دو نقش زیستی بسیار مهم هستند ۲۷

۱-۲۹- ساختار سوم زنجیره پلی‌پپتیدی (ساختمان سه بعدی) ۲۸
۱-۲۹-۱- رابطه براگ ۲۸
۱-۳۰- ساختار چهارم یک پروتئین "پیوند زنجیرهای پلی‌پپتیدی" ۲۹
۱-۳۱- دگرگونی پروتئینها ۳۰
۱-۳۱-۱- درجه حرارت بالا ۳۰
۱-۳۱-۲- اسیدها و بازها ۳۰
۱-۳۱-۳- حلالهای آلی ۳۰
۱-۳۱-۴- اوره و گوانیدین ۳۱
۱-۳۲- طبقه‌بندی پروتئینها ۳۱
۱-۳۲-۱- پروتئینهای ساده ۳۱
۱-۳۲-۱-۱- پروتئینهای کروی ۳۱
۱-۳۲-۱-۲ -پروتئینهای رشته‌ای ۳۱
۱-۳۲-۲ پروتئینهای ترکیبی ۳۱
۱-۳۳- سنتز پپتیدها ۳۳
۱-۳۴- شکل هندسی پیوند پپتیدی ۳۳
۱-۳۵- طرح راماچاندران ۳۵

فصل دوم: تحقیق پیرامون پپتیدها

۲-۱- مقدمه ۴۰
۲-۲- مطالعات انجام شده بر روی تری پپتیدها ۴۰

فصل سوم: روشهای محاسباتی در شیمی کوانتومی

۳-۱- مقدمه ۵۰
۳-۲- نرم افزارهای شیمی کوانتومی ۵۱

۳-۲-۱-Gaussian ۵۱

۳-۲-۲-Gamess ۵۱

۳-۲-۳-Columvus ۵۱

۳-۲-۴-Startan ۵۱

۳-۲-۵-Argus ۵۱

۳-۲-۶-Mopac ۵۲

۳-۳- بهینه سازی هندسی ۵۲

۳-۴- دسته بندی شیمی محاسباتی ۵۲

۳-۴-۱- مکانیک مولکولی ۵۳

۳-۴-۲- روشهای ساختار الکترونی ۵۴

۳-۵- طبقه بندی روشهای کوانتومی ۵۴

۳-۵-۱- روش محاسبات آغازین ۵۴

۳-۵-۱-۱- روش هارتری فاک ۵۵

۳-۵-۱-۲-گرادیان و مشتقات مرتبه دوم هارتری-فاک ۵۷

۳-۵-۱-۳-.روش هارتری-فاک محدود شده (RHF) و غیر محدود شده (UHF) ۵۷

۳-۵-۱-۴-.روشهای همبستگی الکترون ۵۷

۳-۵-۱-۴-۱-تئوری اختلال مولر پلست ۵۸

۳-۵-۱-۴-۲- برهمکنش پیکربندی (CI) ۶۰

۳-۵-۱-۴-۳-میدان خود سازگار چند آرایشی ۶۱

۳-۵-۱-۴-۴- برهمکنش پیکربندی چند مرجعی(MRCI) ۶۲

۳-۵-۱-۴-۵- خوشه‌های جفت‌شده ۶۲

۳-۵-۱-۲- تواناییهای روش Ab initio ۶۳

۳-۵-۲- روشهای نیمه تجربی ۶۵
۳-۵-۲-۱- هوکل ۶۶
۳-۵-۲-۲- هوکل بسط یافته ۶۶
۳-۵-۲-۳- PPP ۶۷
۳-۵-۲-۴-CNDO ۶۷
۳-۵-۲-۵- MINDO ۶۷
۳-۵-۲-۶- MNDO ۶۸
۳-۵-۲-۷- INDO ۶۹
۳-۵-۲-۸- ZINDO ۶۹
۳-۵-۲-۹- SINDO ۶۹
۳-۵-۲-۱۰-PRDDO ۷۰
۳-۵-۲-۱۱- AM_1 ۷۰
۳-۵-۲-۱۲- PM_3 ۷۱
۳-۵-۲-۱۳- PM_3/TM ۷۱
۳-۵-۳- نظریه تابعیت چگالی ۷۲
۳-۵-۳-۱- روشها ۷۲
۳-۵-۳-۲- انتخاب تابع ۷۶
۳-۶- سریهای پایه ۷۷

فصل چهارم: محاسبات و نتایج

۴-۱- مقدمه ۸۲
۴-۲- روش کار ۸۲
۴-۳- تعیین صورتبندیهای حاصل از چرخش زنجیر جانبی χ ۸۳

۴-۴- بررسی صورتبندیهای اولین زاویه زنجیر جانبی(χ_1) ۹۲

۴-۵- بررسی صورتبندیهای دومین زاویه زنجیر جانبی (χ_2) ۱۰۰

۴-۶- بررسی زوایای دو وجهی و زاویه پیوندی زنجیر جانبی ۱۱۹

۴-۷- تعیین صورتبندیهای حاصل از چرخش زوایای دو وجهی اسکلت ۱۲۰

۴-۷-۱- بررسی پایداری زوایای Φ_1 ۱۳۰

۴-۷-۲- بررسی پایداری زاویه Ψ_1 ۱۴۲

۴-۷-۳- بررسی پایداری زاویه Φ_2 ۱۵۴

۴-۷-۴- بررسی پایداری زاویه Ψ_2 ۱۶۵

۴-۷-۵- بررسی پایداری زاویه ϕ_3 ۱۷۵

۴-۷-۶- بررسی زاویه Ψ_3 ۱۸۶

۴-۸- بررسی نقشه های راما چاندران برای

تری پپتید $HCO\text{-}GLY\text{-}L\text{-}ILE\text{-}GLY\text{-}NH_2$ ۱۸۱

نتیجه گیری ۲۰۹

منابع

فهرست منابع فارسی ۲۱۰

فهرست منابع غیر فارسی ۲۱۳

چکیده انگلیسی ۲۱۸

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
پژوهشگاه علوم و فناوری اطلاعات ایران
IRANDOC
مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران

فهرست جدولها

عنوان **صفحه**

جدول۱-۱-اسیدهای آمینه استاندارد در ساختار پروتئینها ۷

جدول۱-۲-مقادیر زوایای دو وجهی ایده آل برای هر یک از کنفورمرهای مربوط به نقشه راماچاندران ۳۸

جدول۲-۱- برخی زوایای دای‌هدرال و مقادیر انرژی برای تغییرات اولین گلایسین ۴۲

جدول۲-۲- برخی زوایای دای‌هدرال و مقادیر انرژی برای تغییرات گلایسین مرکزی ۴۲

جدول۲-۳- برخی زوایای دای‌هدرال و مقادیر انرژی برای تغییرات گلایسین انتهایی ۴۲

جدول۲-۴-مقادیر انرژی الکتریکی، آنتالپی، انرژی آزاد گیبس و آنتروپی

$HCO\text{-}Gly\text{-}Gly\text{-}Gly\text{-}NH_2$ در سطح RHF/۶-۳۱G(d,p) ۴۳

جدول۲-۵ صورتبندیهای بهینه شده برای $HCO\text{-}Gly\text{-}Gly\text{-}Gly\text{-}NH_2$ در سطح

RHF/۶-۳۱G(d,p) ۴۴

جدول۲-۶-خلاصه انرژیهای کل، مرتبط با زوایای دای هدرال برای

N-Ac-D-Ala-Gly[β]-L-Ala-NH-Me ۴۶

جدول۲-۷-خلاصه انرژیهای کل، مرتبط با زوایای دای هدرال برای

N-Ac-D-Ala-Gly[β]-L-Ala-NH-Me ۴۶

جدول۲-۸- طول پیوندهای C-H و زوایای پیوندی N-Cα-CO برای

N-Ac-D-Ala-Gly[β]-L-Ala-NH-Me ۴۶

جدول۲-۹- طول پیوندهای C-H و زوایای پیوندی N-Cα-CO برای

N-Ac-L-Ala-Gly[β]-L-Ala-NH-Me ۴۷

جدول۳-۱: انواع روشهای DFT همراه با علائم و اختصارات آنها ۷۵

جدول۴-۱-مقادیر انرژی(E) و انرژی نسبی (ΔE) در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d)

نسبت به تغییرات زنجیر جانبی χ_1 ۹۰

جدول۴-۲- بررسی فاصله ها ۹۳

جدول ۴-۳- مقادیر انرژی(E) و انرژی نسبی (ΔE) در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) نسبت به تغییرات زنجیر جانبی$\chi_۲$ در حالتی که ۳۰۰ = $\chi_۱$ می باشد ۹۸

جدول۴-۴- فاصله ها برای زوایای۳۰۰ = $\chi_۱$ ۱۰۰

جدول۴-۵- مقادیر انرژی(E) و انرژی نسبی (ΔE) در سطح HF/۶-۳۱G(d) و $B_۳$LYP/۶-۳۱G(d) نسبت به تغییرات زنجیر جانبی$\chi_۲$ در حالتی که ۶۰ = $\chi_۱$ می باشد ۱۰۶

جدول۴-۶- فاصله ها برای زاویه ۶۰= $\chi_۱$ ۱۰۸

جدول۴-۷- مقادیر انرژی(E) و انرژی نسبی (ΔE) در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) نسبت به تغییرات زنجیر جانبی$\chi_۲$ در حالتی که ۱۸۰=$\chi_۱$ می باشد ۱۱۳

جدول۴-۸- فاصله ها برای زاویه ۱۸۰=$\chi_۱$ ۱۱۶

جدول۴-۹- مقادیر زوایای دووجهی و زاویه پیوندی در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۱۷

جدول۴-۱۰- مقادیر زوایای دووجهی و زاویه پیوندی در سطح $B_۳$LYP/۶-۳۱G(d) ۱۱۸

جدول ۴-۱۱- مقادیر انرژی(E)، انرژی نسبی (ΔE)، با تغییر زاویه $\varphi_۱$ در سطح HF/۶-۳۱G(d) و $B_۳$LYP/۶-۳۱G(d) ۱۲۲

جدول۴-۱۲- مقادیرانرژی آزاد گیبس تصحیح شده (ε_0 + G)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG) با تغییر زاویه $\varphi_۱$ در سطح HF/۶-۳۱G(d) و $B_۳$LYP/۶-۳۱G(d) ۱۲۴

جدول۴-۱۳- مقادیرآنتالپی تصحیح شده (ε_0 +H) ، تغییرات آنتالپی (ΔH) با تغییر زاویه $\varphi_۱$ در سطح HF/۶-۳۱G(d) و $B_۳$LYP/۶-۳۱G(d) ۱۲۶

جدول۴-۱۴- مقادیر آنتروپی (ΔS) با تغییر زاویه $\varphi_۱$ در سطح HF/۶-۳۱G(d) و $B_۳$LYP/۶-۳۱G(d) ۱۲۸

جدول۴-۱۵- فاصله ها برای زاویه $\Phi_۱$ ۱۳۱

جدول۴-۱۶- مقادیر انرژی(E)، انرژی نسبی (ΔE)، با تغییر زاویه ψ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۳۴

جدول۴-۱۷- مقادیرانرژی آزاد گیبس تصحیح شده ($G + \varepsilon_0$)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG) با تغییر زاویه ψ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۳۶

جدول۴-۱۸- مقادیرآنتالپی تصحیح شده ($H + \varepsilon_0$)، تغییرات آنتالپی (ΔH) با تغییر زاویه ψ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۳۸

جدول۴-۱۹- مقادیرآنتروپی (ΔS) با تغییر زاویه ψ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۴۰

جدول۴-۲۰- فاصله‌ها برای زاویه Ψ_1 ۱۴۳

جدول۴-۲۱- مقادیر انرژی(E)، انرژی نسبی (ΔE)، با تغییر زاویهφ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۴۶

جدول۴-۲۲- مقادیرانرژی آزاد گیبس تصحیح شده ($G + \varepsilon_0$)، تغییرات انرژی آزاد گیبس (ΔG) با تغییر زاویه φ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۴۸

جدول۴-۲۳- مقادیرآنتالپی تصحیح شده ($H + \varepsilon_0$)، تغییرات آنتالپی (ΔH) با تغییر زاویه φ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۵۰

جدول۴-۲۴- مقادیرآنتروپی (ΔS) با تغییر زاویه φ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۵۲

جدول۴-۲۵- مقادیر انرژی(E)، انرژی نسبی (ΔE)، با تغییر زاویه ψ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۵۷

جدول۴-۲۶- مقادیرانرژی آزاد گیبس تصحیح شده ($G + \varepsilon_0$)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG) با تغییر زاویه ψ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۵۹

جدول۴-۲۷- مقادیرآنتالپی تصحیح شده (ε_0 +H)، تغییرات آنتالپی (ΔH) با تغییر زاویه ψ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۶۱

جدول۴-۲۸- مقادیرآنتروپی (ΔS) با تغییر زاویه ψ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۶۳

جدول۴-۲۹- مقادیر انرژی(E)، انرژی نسبی (ΔE)، با تغییر زاویه φ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۶۷

جدول۴-۳۰- مقادیرانرژی آزاد گیبس تصحیح شده (ε_0 + G)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG) با تغییر زاویه φ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۶۹

جدول۴-۳۱- مقادیرآنتالپی تصحیح شده (ε_0 + H)، تغییرات آنتالپی (ΔH) با تغییر زاویه φ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۷۱

جدول۴-۳۲- مقادیرآنتروپی (ΔS) با تغییر زاویه φ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۷۳

جدول۴-۳۳- مقادیر انرژی(E)، انرژی نسبی (ΔE)، با تغییر زاویه ψ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۷۸

جدول۴-۳۴- مقادیرانرژی آزاد گیبس تصحیح شده (ε_0 + G)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG) با تغییر زاویه ψ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۸۰

جدول۴-۳۵- مقادیرآنتالپی تصحیح شده (ε_0 + H)، تغییرات آنتالپی (ΔH) با تغییر زاویه ψ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۸۲

جدول۴-۳۶- مقادیرآنتروپی (ΔS) با تغییر زاویه ψ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) و B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۸۴

جدول۴-۳۷-مقادیر انرژی(E)،انرژی نسبی(ΔE) و زوایای دو وجهی برای کنفورمرهای HCO-Gly-ILE-Gly-NH_2 در حالت (β_L-X-β_L) در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۱۱

جدول۴-۳۸- :مقادیر انرژی(E)،انرژی نسبی(ΔE) و زوایای دو وجهی برای صورتبندیهای
$HCO\text{-}Gly\text{-}ILE\text{-}Gly\text{-}NH_2$ در حالت $(\beta_L\text{-}X\text{-}\beta_L)$ در سطح $B_3LYP/6\text{-}31G(d)$ ۱۹۲
جدول۴-۳۹- مقادیر انرژی(E)،انرژی نسبی(ΔE) و زوایای دو وجهی برای صورتبندیهای
$HCO\text{-}Gly\text{-}ILE\text{-}Gly\text{-}NH_2$ در حالت($X\text{-}\beta_L\text{-}\beta_L$) در سطح $HF/6\text{-}31G(d)$ ۱۹۴
جدول۴-۴۰- مقادیر انرژی(E)،انرژی نسبی(ΔE) و زوایای دو وجهی برای صورتبندیهای
$HCO\text{-}Gly\text{-}ILE\text{-}Gly\text{-}NH_2$ در حالت $X\text{-}\beta_L\text{-}\beta_L$ در سطح $B_3LYP/6\text{-}31G(d)$ ۱۹۵
جدول۴-۴۱- مقادیر انرژی(E)،انرژی نسبی(ΔE) و زوایای دو وجهی برای صورتبندیهای
$HCO\text{-}Gly\text{-}ILE\text{-}Gly\text{-}NH_2$ در حالت $\beta_L\text{-}\beta_L\text{-}X$ در سطح $HF/6\text{-}31G(d)$ ۱۹۷
جدول۴-۴۲- مقادیر انرژی(E)،انرژی نسبی(ΔE) و زوایای دو وجهی برای صورتبندیهای
$HCO\text{-}Gly\text{-}ILE\text{-}Gly\text{-}NH_2$ در حالت $\beta_L\text{-}\beta_L\text{-}X$ در سطح $B_3LYP/6\text{-}31G(d)$ ۱۹۸
جدول۴-۴۳-انرژی آزادگیبس(G)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG)، آنتالپی،ΔH، آنتروپی وΔS در حالت
$(\beta_L\text{-}X\text{-}\beta_L)$ در سطح $B_3LYP/6\text{-}31(d)$ ۲۰۱
جدول۴-۴۴-انرژی آزادگیبس(G)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG)، آنتالپی،ΔH، آنتروپی وΔS درحالت
$(\beta_L\text{-}X\text{-}\beta_L)$ در سطح $HF/6\text{-}31G(d)$ ۲۰۲
جدول۴-۴۵-انرژی آزادگیبس(G)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG)، آنتالپی،ΔH، آنتروپی وΔS درحالت
$(\beta_L\text{-}\beta_L\text{-}X)$ در سطح $B_3LYP/6\text{-}31(d)$ ۲۰۳
جدول۴-۴۶-انرژی آزادگیبس(G)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG)، آنتالپی،ΔH، آنتروپی وΔS درحالت
$(\beta_L\text{-}\beta_L\text{-}X)$ در سطح $HF/6\text{-}31G(d)$ ۲۰۴
جدول۴-۴۷-انرژی آزادگیبس(G)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG)، آنتالپی،ΔH، آنتروپی وΔS درحالت
$(X\text{-}\beta_L\text{-}\beta_L)$ د در سطح $B_3LYP/6\text{-}31(d)$ ۲۰۵
جدول۴-۴۸-انرژی آزادگیبس(G)، تغییرات انرژی آزاد گیبس(ΔG)، آنتالپی،ΔH، آنتروپی وΔS درحالت
$(X\text{-}\beta_L\text{-}\beta_L)$ د در سطح $HF/6\text{-}31G(d)$ ۲۰۶

جدول۴-۴۹- مقادیر زوایای پیچشی Φ_iوΨ_iبهینه شده به همراه مقادیر جفت زوایای پیچشی ایده‌آل در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۲۰۷

جدول۴-۵۰- مقادیر زوایای پیچشی Φ_iوΨ_iبهینه شده به همراه مقادیر جفت زوایای پیچشی ایده آل در سطح B_3LYP/۶-۳۱(d) ۲۰۸

فهرست نمودارها

عنوان	صفحه
نمودار۴-۱- منحنی تغییرات انرژی ($\triangle E$) بر حسب تغییرات χ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d)	۹۱
نمودار۴-۲- منحنی تغییرات انرژی ($\triangle E$) بر حسب تغییرات χ_1 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d)	۹۱
نمودار۴-۳- منحنی تغییرات انرژی نسبت به تغییرات χ_2 در حالتی که ۶۰- = χ_1 می باشد در سطح HF/۶-۳۱G(d)	۹۹
نمودار۴-۴- منحنی تغییرات انرژی نسبت به تغییرات χ_2 در حالتی که ۶۰- = χ_1 می باشد در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d)	۹۹
نمودار۴-۵- منحنی تغییرات انرژی نسبت به تغییرات χ_2 در حالتی که ۶۰ = χ_1 می باشد در سطح HF/۶-۳۱G(d)	۱۰۷
نمودار۴-۶- منحنی تغییرات انرژی نسبت به تغییرات χ_2 در حالتی که ۶۰ = χ_1 می باشد در سطح B_3LYP/۶-۳۱G(d)	۱۰۷
نمودار۴-۷- منحنی تغییرات انرژی نسبت به تغییرات χ_2 در حالتی که ۱۸۰=χ_1 می باشد در سطح HF/۶-۳۱G(d)	۱۱۴
نمودار۴-۸- منحنی تغییرات انرژی نسبت به تغییرات χ_2 در حالتی که ۱۸۰=χ_1 می باشد در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d)	۱۱۴
نمودار۴-۹- منحنی تغییرات Δ E بر حسب تغییراتφ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d)	۱۲۳
نمودار۴-۱۰- منحنی تغییرات Δ E بر حسب تغییراتφ_1 در سطح B_3LYP/۶-۳۱G(d)	۱۲۳
نمودار۴-۱۱- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات φ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d)	۱۲۵
نمودار۴-۱۲- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات φ_1 در سطح B_3LYP/۶-۳۱G(d)	۱۲۵
نمودار۴-۱۳- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات φ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d)	۱۲۷
نمودار۴-۱۴- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات φ_1 در سطح B_3LYP/۶-۳۱G(d)	۱۲۷
نمودار ۴-۱۵- منحنی تغییراتΔS بر حسب تغییرات φ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d)	۱۲۹
نمودار ۴-۱۶- منحنی تغییراتΔS بر حسب تغییرات φ_1 در سطح B_3LYP/۶-۳۱G(d)	۱۲۹

نمودار۴-۱۷- منحنی تغییرات ΔE بر حسب تغییرات ψ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۳۵

نمودار۴-۱۸- منحنی تغییرات ΔE بر حسب تغییرات ψ_1 در سطح B_3LYP/۶-۳۱G(d) ۱۳۵

نمودار۴-۱۹- **منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات ψ_1** در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۳۷

نمودار۴-۲۰- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات ψ_1 در سطح B_3LYP/۶-۳۱G(d) ۱۳۷

نمودار۴-۲۱- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات ψ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۳۹

نمودار۴-۲۲- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات ψ_1 در سطح B_3LYP/۶-۳۱G(d) ۱۳۹

نمودار۴-۲۳- منحنی تغییرات ΔS بر حسب تغییرات ψ_1 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۴۱

نمودار۴-۲۴- منحنی تغییرات ΔS بر حسب تغییرات ψ_1 در سطح B_3LYP/۶-۳۱G(d) ۱۴۱

نمودار۴-۲۵- منحنی تغییرات ΔE بر حسب تغییرات φ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۴۷

نمودار۴-۲۶- منحنی تغییرات ΔE بر حسب تغییرات φ_2 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۴۷

نمودار۴-۲۷- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات φ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۴۹

نمودار۴-۲۸- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات φ_2 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۴۹

نمودار۴-۲۹- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات φ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۵۱

نمودار۴-۳۰- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات φ_2 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۵۱

نمودار۴-۳۱- منحنی تغییرات ΔS بر حسب تغییرات φ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۵۳

نمودار۴-۳۲- منحنی تغییرات ΔS بر حسب تغییرات φ_2 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۵۳

نمودار۴-۳۳- **منحنی تغییرات ΔE بر حسب تغییرات ψ_2** در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۵۸

نمودار۴-۳۴- **منحنی تغییرات ΔE بر حسب تغییرات ψ_2** در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۵۸

نمودار۴-۳۵- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات ψ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۶۰

نمودار۴-۳۶- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات ψ_2 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۶۰

نمودار۴-۳۷- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات ψ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۶۲

نمودار۴-۳۸- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات ψ_2 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۶۲

نمودار۴-۳۹- منحنی تغییرات ΔS بر حسب تغییرات ψ_2 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۶۴

نمودار۴-۴۰- منحنی تغییرات ΔS بر حسب تغییرات ψ_2 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۶۴
نمودار۴-۴۱- منحنی تغییرات ΔE بر حسب تغییرات φ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۶۸
نمودار۴-۴۲- منحنی تغییرات ΔE بر حسب تغییرات φ_3 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۶۸
نمودار۴-۴۳- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات φ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۷۰
نمودار۴-۴۴- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات φ_3 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۷۰
نمودار۴-۴۵- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات φ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۷۲
نمودار۴-۴۶- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات φ_3 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۷۲
نمودار۴-۴۷- منحنی تغییرات ΔS بر حسب تغییرات φ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۷۴
نمودار۴-۴۸- منحنی تغییرات ΔS بر حسب تغییرات φ_3 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۷۴
نمودار۴-۴۹- منحنی تغییرات ΔE بر حسب تغییرات ψ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۷۹
نمودار۴-۵۰- منحنی تغییرات ΔE بر حسب تغییرات ψ_3 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۷۹
نمودار۴-۵۱- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات ψ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۸۱
نمودار۴-۵۲- منحنی تغییرات ΔG بر حسب تغییرات ψ_3 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۸۱
نمودار۴-۵۳- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات ψ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۸۳
نمودار۴-۵۴- منحنی تغییرات ΔH بر حسب تغییرات ψ_3 در سطح B۳LYP/۶-۳۱G(d) ۱۸۳
نمودار۴-۵۵- منحنی تغییرات ΔS بر حسب تغییرات ψ_3 در سطح HF/۶-۳۱G(d) ۱۸۵
نمودار۴-۵۶- منحنی تغییرات ΔS بر حسب تغییرات ψ_2 در سطح B_2LYP/۶-۳۱G(d) ۱۸۵