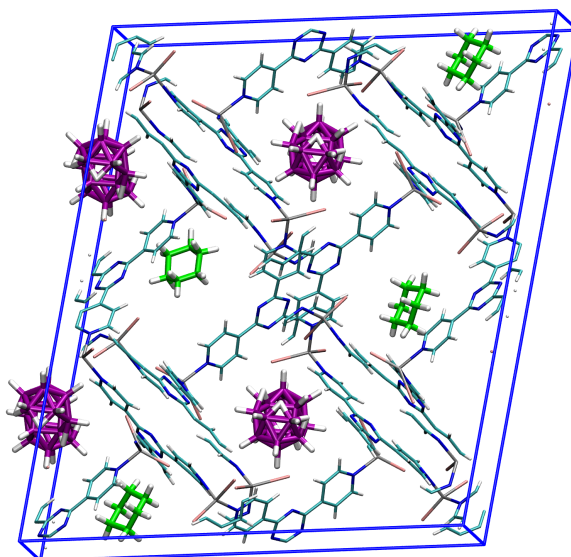


Interakce organokovových sítí s malými molekulami

Vedoucí: Mgr. Filip Šebesta, Ph.D. (filip.sebesta@matfyz.cuni.cz)
Katedra chemické fyziky a optiky

Klasické molekulárně dynamické simulace na základě Hamiltonových pohybových rovnic poskytují cenné informace o distribuci a malých molekul (substrátů) v krystalických materiálech. Pokud doplňují rentgenovou a elektronovou difrakci, mohou významně usnadnit řešení krystalových struktur a poskytnout detailní vhled do interakcí mezi substráty a organokovovými sítěmi (metal-organic framework, MOF). Přesnost jejich výsledků však silně závisí na použitých silových polích pro popis interakcí. Proto je často potřebné jít za hranice klasických simulací a využít hybridní kvantově mechanický/molekulárně mechanický (QM/MM) přístup k upřesnění popisu interakcí mezi substráty a organokovovými sítěmi. Stanovené parametry poté mohou přispět také přispět k řešení struktury substrátů v rámci metody krystalické houby [1]. V této metodě je substrát, který špatně krystalizuje nebo se vyskutejuje v malém množství, absorbován organokovovou sítí a dochází k jeho částečnému uspořádání v rámci pórů v síti. To následně umožní získat jistou informace o struktuře skrze rentgenovou difrakci, kterou lze zpřesnit na základě výpočetně určených struktur.

V rámci projektu se zaměříme na různé QM/MM modely pro přesné stanovení interakci mezi zvolenou organokovovou sítí a substrátem (může se jednat o léčivo např. paracetamol). Vycházet se bude z předešlých klasických simulací a bude se studovat, jak se mění struktura v rámci QM/MM optimalizace a které uspořádání je energeticky nejvýhodnější. Výsledky se porovnají s předešlými klasickými simulacemi a u optimální struktury budeme nakonec analyzovat, které interakce jsou pro její stabilitu nejdůležitější.



Obrázek 1: Příklad studovaného systému

[1] Inokuma, Y., et al. Nature, 2013, 495, 461–466. doi.org/10.1038/nature11990