

Kokkuvõte magistritööst „Meetodid tsükloheksanopoolkukurbituriilide modelleerimiseks“

Autor: Andre Roden

Juhendajad: Toomas Tamm ja Riina Aav

Tallinna Tehnikaülikool, keemia ja biotehnoloogia instituut, 2007

Riina Aava uurimisrühm on 2013. aastast uurinud uudseid asendatud poolkukurbituriile – tsükloheksanopoolkukurbituriile, makrotsüklilisi kiraalseid ühendeid, mis omavad õõnsust, mille sisse on võimalik siduda erinevaid anioonseid ühendeid, moodustades külalis-võõrustaja komplekse. Külalis-võõrustaja komplekseerumisel on tugev potentsiaal rakenduseks ravimiarenduses, orgaanilises sünteesis, ainete tuvastamisel ja kogumisel. Antud töös uuriti tsükloheksanopoolkukurbituriile arvutuslike meetoditega: tihedusfunktsionaalide teooria ja molekulaarmehaanikaga.

Esiteks viidi läbi BP86/SV(P) mudelkeemia valideerimine tsükloheksanopoolkukurbituriilide geomeetria optimeerimisel. BP86/SV(P)-ga optimeeritud struktuurid olid väga sarnased kristallstruktuuriga. Leiti, et antud meetod sobib uuritavate molekulide käsitlemiseks antud töös.

Teiseks tehti põhjalik asendianalüüs kompleksidele, kus külalismolekulideks olid sipelghappe anioon, äädikhappe anioon, trifluoroäädikhappe anioon, kloroform, atsetonitril, (S)-N-atsetüülalaniini anioon ja (S)- γ -hüdrosupalderjanhappe anioon. Kuna asendianalüüsi tegemine on arvutuslikult mahukas, prooviti ja hinnati lihtsustust, kus võõrustajamolekulina käituvaid tsükloheksanopoolkukurbituriile käsitleti jäiga puurina. Jõuti järeldusele, et selline meetod sobib jäigemate molekulide nagu tsükloheksanopoolkukurbit[6]uriili jaoks, kuid mitte paindlike molekulide nagu tsükloheksanopoolkukurbit[8]uriili jaoks.

Kolmandaks kasutati molekulaardünaamikat, et näha komplekse lahustis liikumas. Uuriti põhjalikult tsükloheksanopoolkukurbituriilide käitumist vaakumis ja lahustis, tsükloheksanopoolkukurbit[8]uriili komplekse eelpool mainitud külalismolekulidega ja hinnati neutraliseerimise ning rõhukontrolli viiside mõju simulatsioonile. Leiti, et vastasiooni paigutamisel on oluline mõju aine käitumisele ning et rõhukontrolli mõju võib olla arvatust suurem.

Kõige eelneva käigus saadi teavet komplekside ning tsükloheksanopoolkukurbituriilide asendite ja konformatsioonide, võimalike külalise, võõrustaja, lahusti vaheliste interaktsioonide ja muude komplekseerumise eripärade kohta, mis aitab tulevikus eksperimente kavandada.