

Тема на проекта:

МОЛЕКУЛНОДИНАМИЧНИ И КВАНТОВОХИМИЧНИ СИМУЛАЦИИ С ПОМОЩТА НА ВИСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЕН ИЗЧИСЛИТЕЛЕН КЛЪСТЕР

Научен екип: Изследователи от всички изчислителни групи във Факултет по химия и фармация

Основната изследователска цел на проекта е да се разработи ефективно клъстер за високопроизводителни изчисления, като се въведат в експлоатация изчислителните мощности и след това се използват интензивно за пресмятане на структура и свойства на компоненти за различни съвременни материали. При изчисленията са използвани широк кръг методи и модели – от квантовохимични DFT и post-HF пресмятания на единични молекули до класически молекулнодинамични симулации на мултимолекулни системи съдържащи $\sim 2 \times 10^5$ атома.

Предложени са тетрагонално структурирани двуслойни клъстери на базата на BiFeO_3 и LaFeO_3 като потенциални градивни единици на ефективни перовскитови мултифероиди. Направен е изводът, че фeroелектричните свойства на тези материали могат да се настройват чрез внимателно вариране на съотношението между бисмут и лантан. Изследвано е влиянието на позицията на свързване и вида на електрон-донорен фрагмент върху емисионните характеристики на органични емитери на синя светлина. Показано е, че за ефективно светене най-подходящо е *мета*-свързване на донора към мостова част и че модифициране на донора с метилови или трет-бутилови групи не влияе значимо на оптичните характеристики на съединенията. Проучена е ролята на градивните елементи на редокс-активни метал-органични рамки (MOFs), които могат потенциално да се използват като иновативен клас електродни материали в литиево-йонни батерии. Показано е, че изследваните молекули са перспективни от електрохимична гледна точка за използване в батерии и че комплексообразуването им с никел допълнително повишава електродвижещото напрежение.

Установено е, че фолиевата киселина във воден разтвор може да проявява цис-транс изомерия по амидната връзка, което би могло да модулира биологичната ѝ активност. Проведени са молекулнодинамични симулации на процеса на свързване на фолиева киселина и нейни производни към α -фолатен рецептор вграден в моделна клетъчна мембрана като част от система за насочена доставка на лекарства. Установено е специфично поведение на различните лиганди спрямо рецептора съответстващо качествено на експериментално установената разлика в афинитетите им. Показано е, че мутациите влияят негативно върху свързването на фолиева киселина към протеина, но също така, че се включват компенсаторни механизми, които редуцират негативните ефекти. Предложен е начин за оценка на стабилизацията на лекарството доксорубицин в рамките на компонент от лекарство-преносна система съдържаща златна наночастица и лекарство-свързващ пептид. Демонстрирано е, че лекарството има силен афинитет и към пептида, и към наночастицата и че трябва да се интеркалира между поне два остатъка, за да се стабилизира достатъчно за транспортиране в организма. Идентифицирани са основните фактори на процеса на разпознаване на серия инхибитори от ензима хистон диацетилаза – взаимодействията с протеина на кислороден атом от солфонамидна група

и на водороден атом от анилиден остатък. Изследвано е взаимодействието между напроксен и циклодекстрини, като е симулиран протонен ЯМР спектър. Направен е изводът, че избраният теоретичен метод е бърз и описва добре подобни спектри. Моделирана е адсорбцията на тамоксифен върху силикатна повърхност съдържаща: (1) силанолни групи и (2) модифицирана с карбоксилни групи. Установено е, че лекарствената молекула взаимодейства по-силно с първия тип повърхност и ключов фактор за стабилността на моделираните адсорбционни комплекси върху нея е наличието на взаимодействие между N център от аминок групата и H атом от SiOH група.

В резултат от работата по проекта една научна публикация е излязла от печат в международното реферирано списание с отворен достъп и още две научни публикации са изпратени за печат. Обучени са и няколко студенти, които са защитили с отличен успех две бакалавърски и три магистърски дипломни работи.