

Kis és közepes flexibilitású származékok molekuladinamika alapú ECD számítása

Molecular dynamics-based ECD calculations of derivatives with low and medium flexibility

RIMÓCZI Aliz¹, Dr. FEHÉR Krisztina², BARTA Roland Albert¹, Prof. Dr. KURTÁN Tibor¹, Dr. MÁNDI Attila¹

¹Debreceni Egyetem, Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen Egyetem tér 1., tel.: +3652512900/22470, fax: +3652512744, rimoczi.aliz@science.unideb.hu, <https://kemia.unideb.hu/>

²HUN-REN-DE Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport, 4032 Debrecen Egyetem tér 1., +3652512900/22470, fax: +3652512744, feher.krisztina@science.unideb.hu, <https://kemia.unideb.hu/>

ABSTRACT

We tested a simplified molecular dynamics (MD) based electronic circular dichroism (ECD) calculation approach previously presented in the literature [Covington et al.: *J. Nat. Prod.* 79 (2016) 2530 and Bannwarth et al.: *Chirality* 28 (2016) 365] on four small organic derivatives with low or moderate flexibility. The absolute configurations of these compounds could be determined before but the agreements between the experimental and calculated spectra were not satisfactory via classical conformational analysis based approach. The applied MD-based method relies on un-optimized conformers gained from the MD trajectories. For three compounds the agreements could be considerably enhanced. However, in the case of the fourth compound, trivially named luzulin A we were only able to improve the agreements in the most problematic region of the spectrum by modeling dimer structures. [Mandi et al.: *Int. J. Mol. Sci.* 25 (2024) 6453] Solvent-solute interactions were also investigated but they only seem to have negligible impact in these cases.

Keywords: molecular dynamics, MD, ECD, calculation, dimer

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk során az irodalomban már korábban bemutatott egyszerűsített molekuladinamika (MD) alapú elektronikus cirkuláris dikroizmus számítási módszert [Covington et al.: *J. Nat. Prod.* 79 (2016) 2530 és Bannwarth et al.: *Chirality* 28 (2016) 365] teszteltük négy kisméretű kis és közepes flexibilitású szerves származékon. Ezen vegyületek abszolút konfigurációja korábban is meghatározható volt, de a kísérleti és számított spektrumok egyezése nem volt kielégítő a klasszikus konformációs analízisen alapuló megközelítéssel. Az alkalmazott molekuladinamika alapú módszer az MD trajektóriákból nyert, optimálatlan konformerekre támaszkodik. Három molekula esetében egyértelműen sikerült egyezés javulást elérnünk. Azonban a negyedik, luzulin A triviális nevű vegyület esetében a spektrum legproblémásabb régióját csak dimer szerkezetek modellezésével sikerült javítani. [Mandi et al.: *Int. J. Mol. Sci.* 25 (2024) 6453] Az oldószer-oldott anyag kölcsönhatásokat is vizsgáltuk, de ezekben az esetekben csak elhanyagolható hatásuk mutatkozott.

Kulcsszavak: molekuladinamika, MD, ECD, számolás, dimer