



Studienarbeit

für Herr/Frau cand. M. Sc XXXXXXXX
Matrikelnummer: XXXXXXXX

Molekulardynamische Simulationen zur Vorhersage von $\log P_{o/w}$ Werten von Metall-NHC-Komplexen

Metalloorganische Verbindungen auf Platinbasis finden bereits seit vielen Jahrzehnten in der Krebstherapie Verwendung. Neuartige Gold oder Silber-Komplexe mit heterozyklischen Carbenen (NHC) weisen neben ihrem Potential als Chemotherapeutikum auch ein weites mögliches Einsatzfeld als Antiinfektiva auf. Dem Löslichkeitsverhalten dieser Substanzen kommt entscheidende Bedeutung zu, da deren Synthese, Applikation, Wirkungsweise und Verträglichkeit davon entscheidend beeinflusst wird. Beim gezielten Entwurf von potentiellen Wirkstoffkandidaten kommt daher der Vorhersage dieser Substanzeigenschaften eine große Bedeutung zu. Molekulare Simulationen ermöglichen in diesem Kontext die Ermittlung relativer Löslichkeiten.

In der Arbeitsgruppe „Molekulare Thermodynamik“ am Institut für Thermodynamik wurde bereits mit Hilfe molekularer Simulationsmethoden das Löslichkeitsverhalten von pharmakologischen Substanzen in unterschiedlichen Lösungsmitteln untersucht. Dabei wurden mit dem Pathfinder ein Algorithmus für effiziente Löslichkeitssimulationen für die Vorhersagen der freien Solvatisierungsenthalpie ΔG_{Solv} entwickelt.

Im Rahmen dieser Studienarbeit sollen diese Methodiken zur simulativen Bestimmung der Löslichkeiten auf organometallische Verbindungen angewendet und bewertet werden.

Die Studienarbeit umfasst folgende Arbeitspakete:

- Durchführung von molekulardynamischen Simulationen mit dem molekularen Modell GAFF2/RESP zum Bestimmen des Oktanol-Wasser Verteilungskoeffizienten ($\log P_{o/w}$) für ausgewählte gold- und silberhaltige Organometallkomplexe
- Diskussion des Einfluss der unterschiedlichen Seitengruppen auf den Verteilungskoeffizienten mittels struktureller Analyse der Mikrostruktur

Betreuerin: M. Sc. Miriam Sprick

Prüferin: Prof. Dr.-Ing. Gabriele Raabe