

Abstract

Project Code: MRG5180003
Project Title: Computational Design of Molecular Imprinting Polymer for Determination of an Anti-HIV Drug
Investigator: Asst.Prof.Dr. Piyarat Nimmanpipug
E-mail Address: piyaratn@gmail.com, npiyarat@chiangmai.ac.th
Project Period: 15 May 2008 – 15 May 2010

In this study, Monte Carlo simulation and density functional calculations for the design of molecularly imprinted polymers (MIPs) are investigated. Molecular template, indinavir, using the rational choice of suitable monomer set used in MIP was designed. Monte Carlo simulations were performed for four difference groups based on their functional group: nitrogen containing hydrocarbon (amine), aromatic hydrocarbon, oxygen containing hydrocarbon (acid and ester), and amino-like hydrocarbon. The prepolymerization adducts of the template at different functional monomers were discovered in this study. The binding energy and hydrogen bond networks were analyzed and compared with experimental results to clarify the preferably imprinting complex forming the selective polymer with nanopore structure.

Keywords: Molecular Imprinting Polymer, Indinavir, DFT, MC simulation, hydrogen bond network

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ MRG5180003
ชื่อโครงการ การออกแบบพอลิเมอร์ลอกแบบโมเลกุลด้วยวิธีคอมพิวเตอร์สำหรับใช้วิเคราะห์ยาต้านไวรัส เอช-ไอ-วี
ชื่อนักวิจัย ผศ.ดร.ปิยรัตน์ นิมมานพิภักดิ์
อีเมลล์ piyaratn@gmail.com, npiyarat@chiangmai.ac.th
ระยะเวลาโครงการ 15 พฤษภาคม 2551 – 15 พฤษภาคม 2553

ในการศึกษานี้ ได้ใช้การจำลองด้วยมอนติ คาร์โล และการคำนวณด้วยทฤษฎีเด้นซิตีฟังก์ชันในการติดตามการออกแบบพอลิเมอร์ลอกแบบ (MIPs) ทั้งนี้ เลือกเซตของมอนอเมอร์สำหรับโมเลกุลต้นแบบอินดินาเวียร์ โดยได้ทำการจำลองมอนติ คาร์โล สำหรับสีกุ่มที่แตกต่างกันพิจารณาจากหมู่ฟังก์ชัน อันได้แก่ สารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีไนโตรเจน (เอมีน) สารประกอบไฮโดรคาร์บอนแบบอะโรมาติก สารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีออกซิเจน (กรดและเอสเทอร์) สารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่คล้ายอะมิโน ในการศึกษานี้ได้พบผลก่อนการเกิดพอลิเมอร์ไรเซชันจากปฏิกิริยาการเติมโดยอาศัยมอนอเมอร์ที่มีหมู่ฟังก์ชันต่าง ๆ กัน โดยได้วิเคราะห์พลังงานการยึดจับและโครงข่ายพันธะไฮโดรเจนเปรียบเทียบกับ การทดลองเพื่ออธิบายการเกิดสารเชิงซ้อนการลอกแบบที่มีความจำเพาะจากโครงสร้างโพรงระดับนาโน

คำสำคัญ พอลิเมอร์ลอกแบบ, อินดินาเวียร์, ทฤษฎีเด้นซิตีฟังก์ชัน, พลศาสตร์เชิงโมเลกุล, โครงข่ายพันธะไฮโดรเจน