

## УДК 541.1

**Программа Infovol: подход, основанный на тесселяции и принципе "разделяй и властвуй", для прогнозирования объема полости в каликсареновых кавитандах**  
**Каралаш С.А. (ИТМО), Кротков Н.А. (ИТМО), Шмурыгина А.В. (ИТМО)**  
**Научный руководитель – кандидат химических наук, доцент Муравьев А.А. (ИТМО)**

**Введение.** Кавитанды представляют собой молекулярные контейнеры с пустым внутренним пространством, подходящим для формирования комплексов «хозяин–гость». Эти структуры находят широкое применение в доставке лекарственных веществ [1], молекулярном распознавании [2], визуализации клеток [3], катализе органических реакций за счет стабилизации реакционноспособных интермедиатов [4], а также в процессах сорбции [5].

В зависимости от окружающих условий и характера заместителей кавитанды могут принимать различные геометрические формы, что влияет на размер и форму их молекулярных полостей. Изменение конформации может оказывать влияние на селективность кавитандов к определённым молекулам-гостям, в том числе к ионам металлов и органическим соединениям [6].

Дж. Ребек установил [7], что молекулярное распознавание через инкапсуляцию зависит от коэффициента упаковки. Оптимальное соотношение объёмов «хозяина» и «гостя» составляет  $55 \pm 9$  %, что известно, как правило Ребека. Это значение подчеркивает важность подбора комплементарных пар для максимальной эффективности инкапсуляции.

Таким образом, методы анализа молекулярных полостей кавитандов играют ключевую роль в разработке новых соединений для селективного связывания и инкапсуляции, что имеет значительное значение в фармацевтике, катализе и материаловедении.

**Основная часть.** В ходе работы нами были разработаны два подхода к определению объёмов полостей каликсаренов. Первый из них заключается в ручной обработке молекулы в программе для 3D моделирования (AutoCAD). Данный способ расчета оказался трудозатратным. Кроме того, требуется много времени для расчета объема полости одной молекулы, что является важным фактором при работе с большими группами соединений. В связи с чем нами была написана программа (InfoVol), автоматизирующая процесс расчета, и выполняющая его моментально.

Оба разработанных подхода для расчета свободного объема можно разделить на два основных этапа. Первый этап включает предварительную обработку входного файла и является обязательным для обоих подходов. На этом этапе оптимизируется трехмерная геометрия анализируемого кавитанда. Далее трехмерные координаты атомов в \*xyz-файле дополнительно корректируются путем интуитивного выбора атомов за пределами рассматриваемой полости (то есть атомов, в которых сфера VdW не является частью полости) и их ручного удаления.

Второй этап для “ручного” подхода включает в себя построение оболочки полости по координатам атомов, с последующим вычитанием из получившегося тела Ван-дер-Ваальсовых сфер атомов в AutoCAD. В случае InfoVol, автоматический расчет происходит с использованием алгоритма “Разделяй и властвуй” через построение ConvexHull.

**Выводы.** Разработаны два новых подхода к расчету теоретических объёмов полостей каликсаренов. Было показано, что сходимость результатов вычисления разработанных нами подходов составляет более 96% для исследуемых каликсаренов. Кроме того, была продемонстрирована более высокая точность расчетов, по сравнению с существующими программами, способных проводить подобные вычисления.

**Список использованных источников:**

1. Y. Li, N. Vrana, B. Letellier, P. Lavalley and C. Guilbaud-Chéreau, *Biomed Mater*, 2024, **19**(4).
2. M. Kobayashi, M. Takatsuka, R. Sekiya and T. Haino, *Org. Biomol. Chem.*, 2015, **13**, 1647–1653.
3. Y. Ghang, M. Schramm, F. Zhang, R. Acey, C. David, E. Wilson, Y. Wang, Q. Cheng and R. Hooley, *J. Am. Chem. Soc.*, 2013, **135**, 7090–7093.
4. R. J. Hooley and J. Rebek Jr., *Chem. Biol.*, 2009, **16**, 255–264.
5. F. Bianchi, R. Pinalli, F. Ugozzoli, S. Spera, M. Careri and E. Dalcanale, *New J. Chem.*, 2003, **27**, 502-509.
6. K. M. O'Connor, G. Svehla, S. J. Harris and M. A. McKervey, *Talanta*, 1992, **39**, 1549-1554.
7. S. Mecozzi and J. Rebek Jr., *Chem.dEur. J.*, 1998, **4**, 1016–1022.