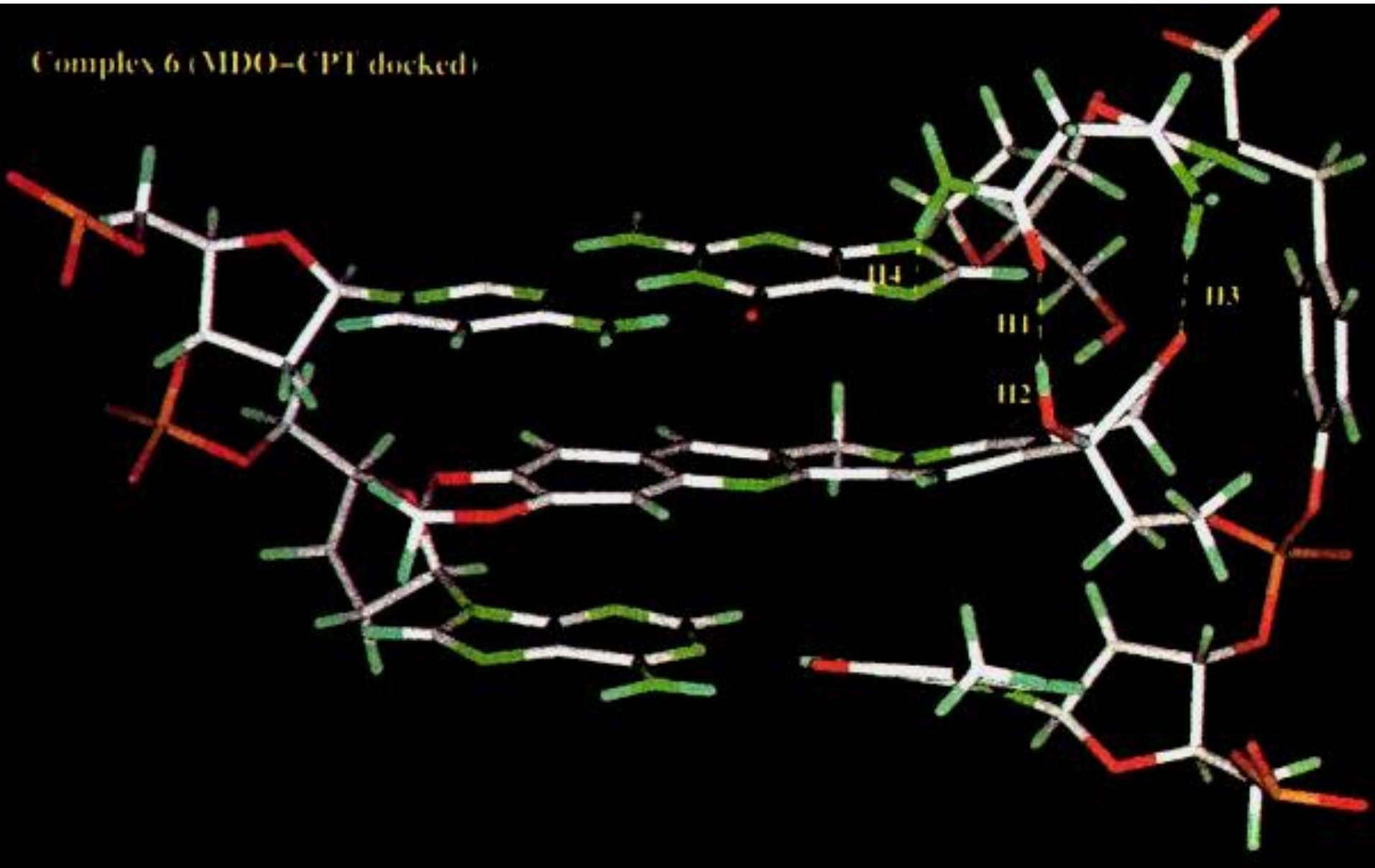


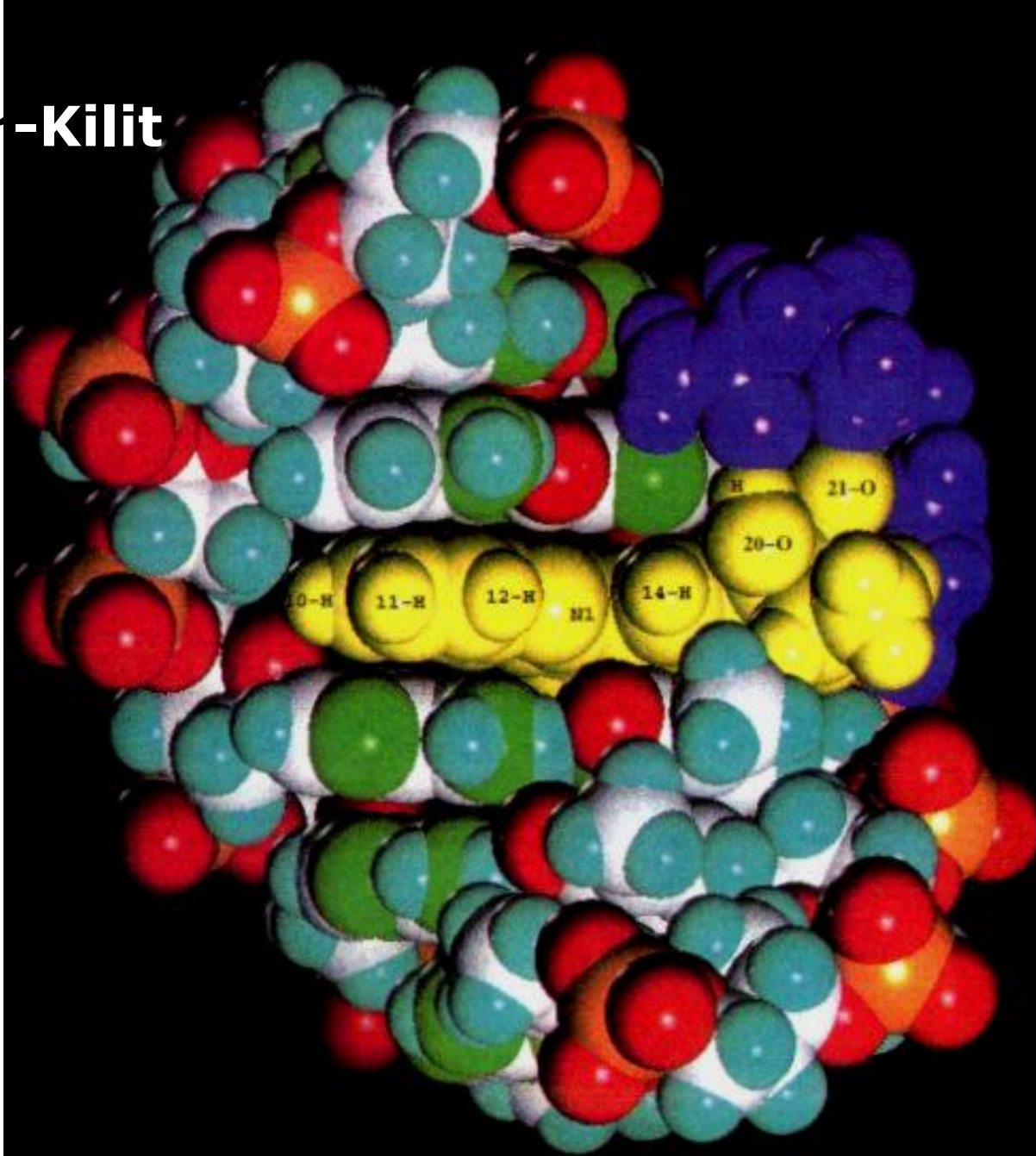
3 Boyutlu Moleküler Yapının Oluşturulması

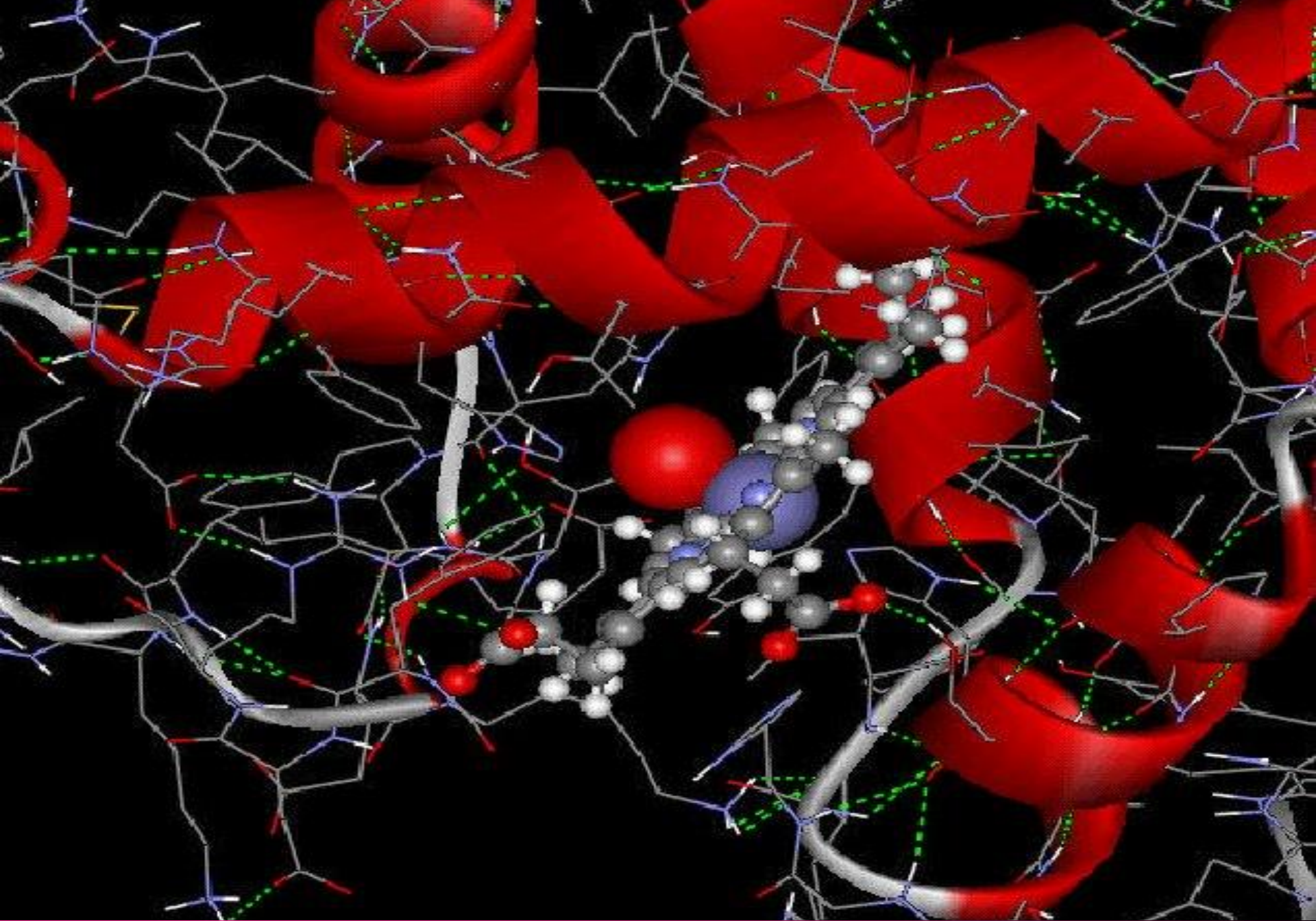
- > İLK KEZ 1970'TE BİLGİSAYARDA MOLEKÜLÜN ROTASYONU GÖRÜNTÜLENMİŞTİR
- > MOLEKÜLER MODELLEMENİN GELİŞMESİ NÜKLEER FİZİKTEKİ GELİŞMELER İLE PARALEL OLMUŞTUR
ör: KRİSTALOGRAFİ, NMR vb.
- > 3-BOYUTLU ÇALIŞMA BİLEŞİKLERİN UZAYDAKİ TÜM ÖZELLİKLERİNİN TANIMLANMASIDIR

Complex 6 (MDO-CPT docked)



Anahtar-Kilit Örneđi







3 Boyutlu Moleküler Yapının Oluşturulması

BİLGİSAYAR ORTAMINDA 3D YAPININ OLUŞTURULMASI

- 1) X-IŞINLARI KRİSTALOGRAFİSİ ARACILIĞI İLE OLUŞTURULAN VERİ BANKALARI (DATABASE)
- 2) FRAGMAN VERİLERİ
- 3) TASLAK ÇİZMEK



Geometrik Optimizasyon

MOLEKÜLLERİN DAYANIKLI OLDUĞU EN DÜŞÜK ENERJİLİ KONFORMASYONU BULUNUR

↑ MOLEKÜLER MEKANİK YÖNTEMİ KULLANILIR
Moleküler geometri ve enerjiler hesaplanır

Geometrik Optimizasyon

Bu yöntemde potansiyel enerji **Hooke Kanunu** na göre hesaplanır.

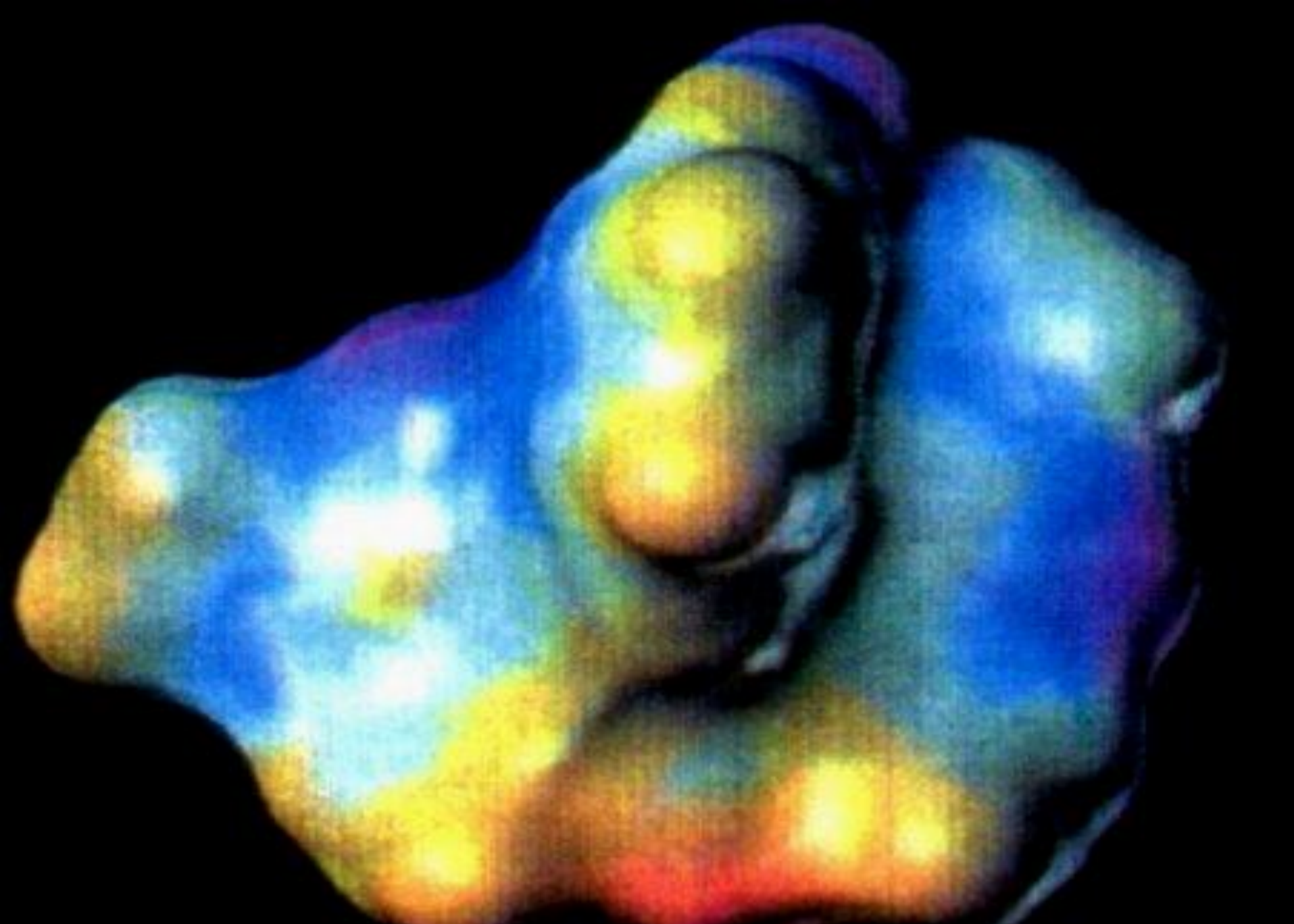
$$E_{\text{tot}} = E_{\text{str}} + E_{\text{bend}} + E_{\text{tors}} + E_{\text{vdw}} + E_{\text{elec}} + \dots$$

E_{tot} = Molekülün total enerjisi, E_{str} = Bağ gerilim enerjisi, E_{bend} = Bağ eğilimi enerjisi, E_{tors} = Torsiyon enerjisi, E_{vdw} = Van der Waals enerjisi, E_{elec} = Elektrostatik enerji

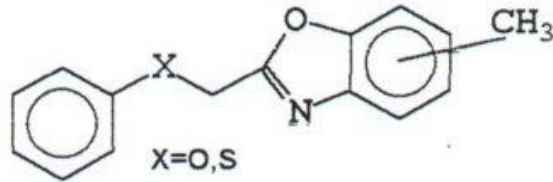
AKTİF KONFORMASYON GENELLİKLE EN DÜŞÜK ENERJİLİ KONFORMASYONLARDAN BİRİSİDİR

- > NMR TEKNİKLERİ İLE SADECE BİR KAÇ KONFORMERİN YAPISI SAPTANABİLİR.
- > TEORİK HESAPLAMALARLA TÜM KONFORMER HESAPLARI YAPILABİLMEKTEDİR.

PRATİK > X-ışınları kristalografisi ile konformasyon analizleri gerçekleştirilir



Sentezlediğimiz Bileşiklere ait Kristalografik Analiz Sonuçları

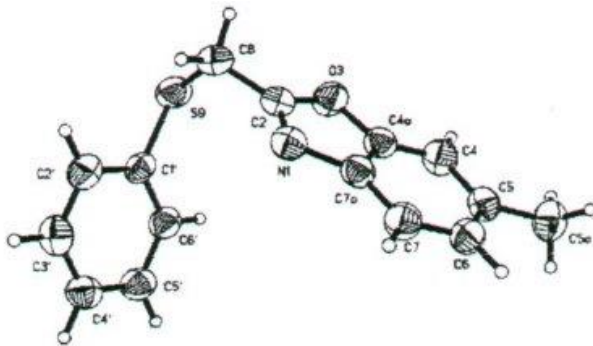


1: X=S, CH₃ at C5

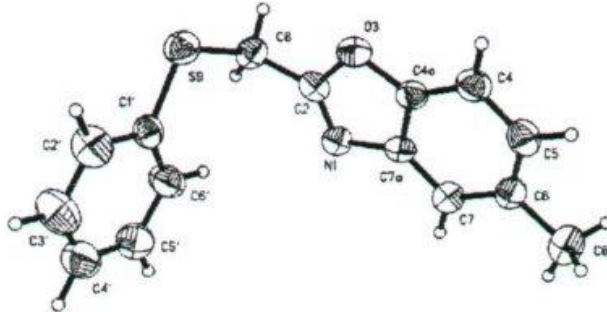
2: X=S, CH₃ at C6

3: X=O, CH₃ at C5

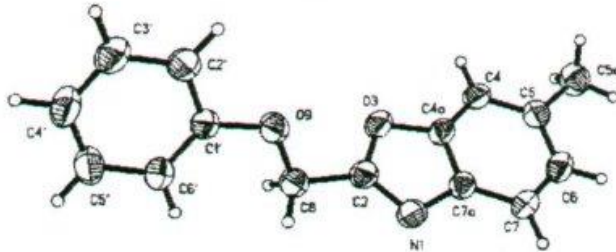
4: X=O, CH₃ at C6



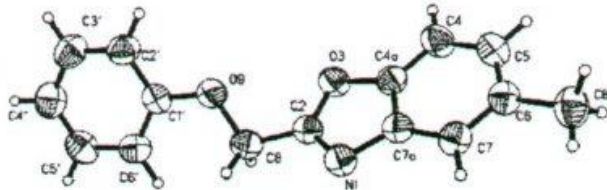
1



2



3



4

ORTEP drawing for molecules 1-4.