

KOMPUTASYONEL KİMYA



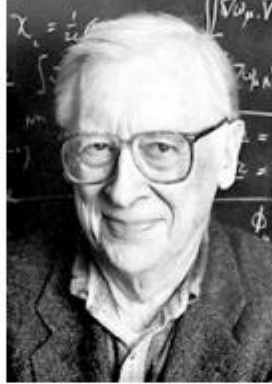
MOLEKÜLER MODELLEME

TÜM KİMYASAL PROBLEMLERİN ÇÖZÜMÜ

The Nobel Prize in Chemistry 1998



Walter Kohn
Prize share: 1/2



John A. Pople
Prize share: 1/2

The Nobel Prize in Chemistry 1998 was divided equally between Walter Kohn *"for his development of the density-functional theory"* and John A. Pople *"for his development of computational methods in quantum chemistry"*.

Photos: Copyright © The Nobel Foundation

Share this: [f](#) [G+](#) [t](#) [+](#) [e](#) 33

1998 de Pople ve Kohn`a komputasyonel yöntemlerin ve moleküler modellemenin geliştirilmesi konusunda (DFT) yaptıkları katkılardan dolayı Nobel Ödülü kazanmıştır.

2013 Nobel ödülü 'sanal kimyaya' verildi

9 Ekim 2013

Paylaş

2013 Nobel Kimya Ödülü, "kimya deneylerini sanal ortama taşıyan" üç bilim adamına verildi.



Bu yılki ödülü, Stanford Üniversitesi'nde görevli İngiliz-Amerikan vatandaşı Martin Karplus, Strasbourg Üniversitesinde görevli Amerikan-Avusturya vatandaşı Michael Levitt ve Southern California Üniversitesinde görevli Amerikan-İsrail vatandaşı Arieh Warshel paylaşacaklar.

Üç bilim adamı kimyasal süreçleri anlayabilmek için bilgisayarda benzeşimler geliştirdi ve farmakoloji çalışmalarında yeni bir dönemin temellerini attı.

İsveç Kraliyet Bilimler Akademisi, açıklamasında, "2013 Nobel Kimya Ödülü'nün sahipleri, bilgisayar aracılığıyla kimyanın esrarengiz yönlerini ortaya koydular. Günümüzde bilgisayar, kimya alanında çalışanlar için, deney tüpü kadar önemli bir gereç. Kimyasal süreçleri ayrıntılı bir şekilde öğrenebilmek, katalizörlerin, ilaçların ve güneş pillerinin en iyi şekilde kullanılabilmesini sağlayacak." dedi.

Bilgisayarda proteinin yapısını oluşturmak ve sonra neyi nasıl gerçekleştirdiğini anlayabilmek.

KOMPUTASYONEL KİMYA (MOLEKÜLER MODELLEME) KONULARI

1. Moleküler geometri

Moleküllerin biçimleri (bağ uzunlukları, açılar, dihedral açılar)

2. Kimyasal Reaktivite

Elektronların nerede yoğunlaştığı (nükleofilik bölgeler) ,
elektronların nereye gitmek istedikleri (elektrofilik bölgeler).

3. IR, UV, NMR Spektrumları

Kimyasal yapı biliniyorsa, spektrumu bulunabilir.

4. Bir enzimin bir substrat ile etkileşmesi

Bir molekülün enzimin aktif bölgesine uyumunun incelenmesi ve
daha etkin moleküllerin tasarlanması

6. Moleküllerin fizikokimyasal özelliklerinin belirlenmesi

Hidrofobik, elektronik, sterik özelliklerin belirlenmesinde

5. Moleküllerin fiziksel özelliklerinin saptanması

Bu özellikler daha çok malzeme bilimi ile ilgilidir. Polimerlere bir
maddenin bağlanması erime derecesi ve polimer gücünde yaptığı
değişiklikler incelenir.