

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

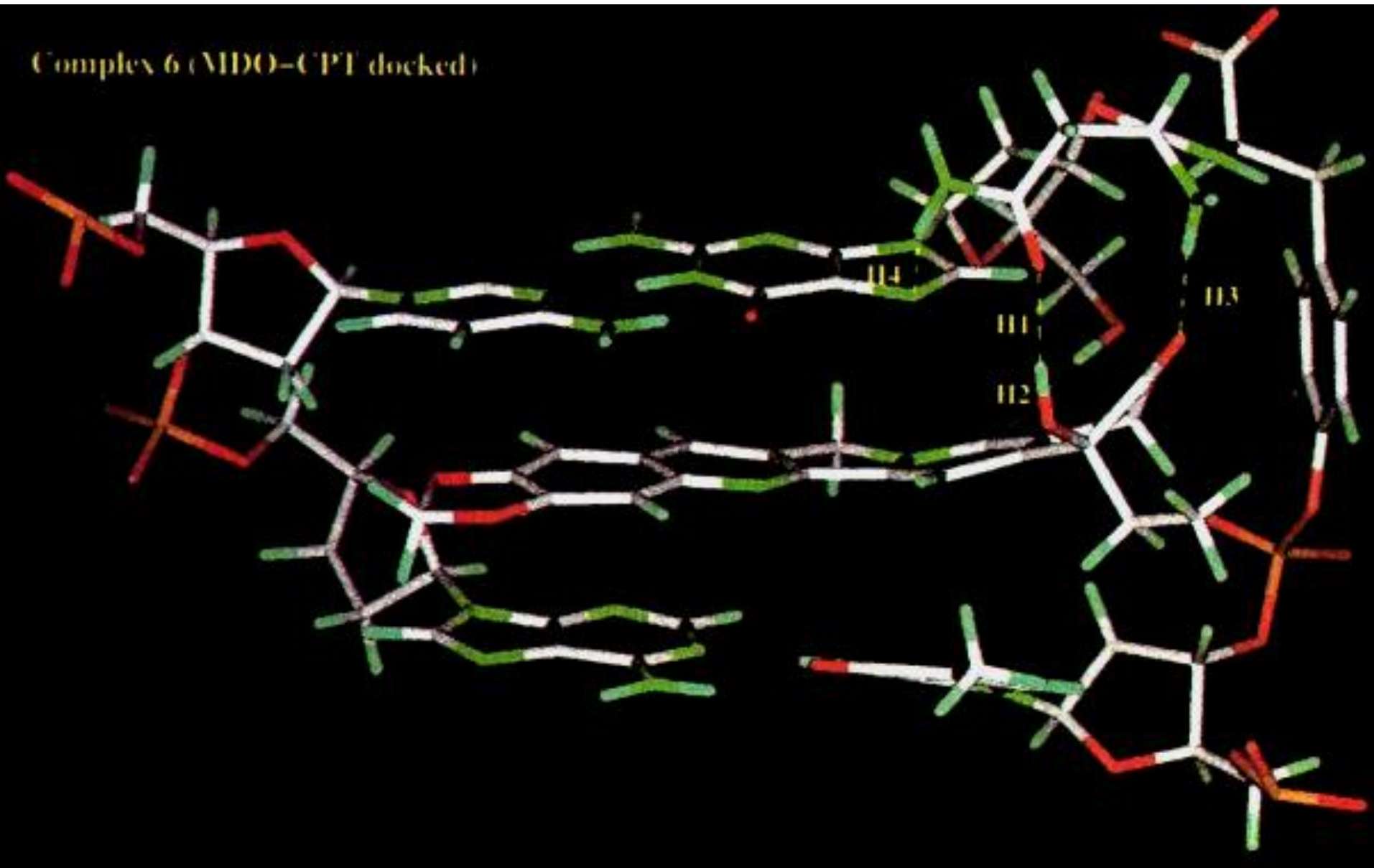
A 3D molecular structure visualization showing a complex network of atoms and bonds. The atoms are represented by colored spheres (purple, green, red, cyan) and the bonds by sticks. The structure is set against a background of overlapping translucent planes in various colors (orange, green, red, cyan).

3 Boyutlu Moleküler Yapının Oluřturulması

BİLGİSAYAR ORTAMINDA 3D YAPININ OLUŐTURULMASI

- 1) X-IŐINLARI KRİSTALOGRAFİSİ ARACILIĐI İLE OLUŐTURULAN VERİ BANKALARI (DATABASE)
- 2) FRAGMAN VERİLERİ
- 3) TASLAK ÇİZMEK

Complex 6 (MDO-CPT docked)



Anahtar-Kilit Örneđi

