

Biyolojik Aktif Bazı Maddelerin Teorik Olarak İncelenmesi

Hava Eydemir

ÖZET

Bu çalışmada biyolojik aktif olan, pürin katabolizmasında önemli rolleri bulunan adenozin, guanozin, guanin, inozin, hipoksantin, ksantin ve ürik asit teorik olarak incelendi.

Moleküllerin gaz, su ve kan fazında, fiziksel ve termodinamik özellikleri ile yapısal parametreleri Gaussian 03W programında Hartree-Fock (HF) metodu ve Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT/B3LYP) hibrit yaklaşımı ile 6-31G(d,p) ve 6-31+G(d,p) temel setleri kullanılarak hesaplandı.

Yapılan hesaplamalarda çalışılan moleküllerin yapılarını aydınlatmak için bağ uzunlukları, bağ açıları, dihedral açıları, dipol moment, en yüksek dolu moleküler orbital (HOMO), en düşük boş moleküler orbital (LUMO) enerjileri, nükleofilite(η) ve serbest enerji (ΔG) değerleri HF ve DFT metotları ile hesaplandı. Elde edilen sonuçlara göre herbir molekül için en kararlı tautomer bulundu. Sonra bu kararlı tautomerlere Se atomu bağlandı. Tekrar serbest enerji (ΔG) değerleri kontrol edildi. Sonuçta ürik asit miktarını kontrol etmek için, bizim çalışmamızda bulunan sonuçlara göre, Se atomunun bağlanması gereken en uygun molekülün hipoksantin olduğu saptandı.

Bu hesaplamalarda DFT yöntemi HF yöntemine göre daha başarılı bulundu.

Anahtar Kelimeler:pürin katabolizması,hipoksantin, ürik asit, tautomerizm,Se atomu, HF(Hartree-Fock), DFT