

Enstitüsü : Fen Bilimleri
Dalı : Fizik
Programı : Fizik
Tez Danışmanı : Prof. Dr. Sevim Akyüz
Tez Türü ve Tarihi : Yüksek Lisans – Eylül 2013

KISA ÖZET

AMİNOPRİMİDİN MOLEKÜLLERİNİN DİMERİK YAPILARININ AB-INITIO DFT YÖNTEMİ İLE İNCELENEREK TİTREŞİM FREKANSLARININ HESAPLANMASI

Merve Akgün

Primidin, genellikle nükleik asitlerde, vitaminlerin bir çoğunda ayrıca koenzim ve antibiyotiklerde bulunan azotlu aromatik bazların genel ismidir. Primidinler, özellikle kondanse türevleri halinde, doğada canlı organizmalarda yaygın bir şekilde bulunur. Primidin türevleri, hipertansiyon, kalp ritim bozukluğu ve boğaz iltihabı rahatsızlıklarının tedavisinde, antiviral olarak kullanılan anti metabolitlerde, anti kanser ilacı olarak geliştirilen Zidovudin'de, kozmetik sektöründe, kırışıklıkların tedavisinde, saç diplerinin güçlendirilmesinde, gri saç oluşumunu engellemek için epidermis tabakasının güçlendirilmesinde kullanılır.

Bu çalışmada, pek çok biyolojik işlevi olan 2-Aminoprimidin molekülünün monomerik ve dimerik yapılarının en düşük enerjili geometrisi, titreşim frekans ve kipleri Gaussian 05 programı kullanılarak, Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT) yöntemi, 6-311++ G(d,p) baz seti ile hesaplanmıştır.

2-Aminoprimidin molekülünün nokta grubu NH_2 ' nin yönelimine göre değişir, en düşük enerjili durumda NH_2 halka düzlemiyle aynı düzlemde olmadığı ve nokta grubunun C_s olduğu saptanmıştır.

Dimerik yapıda, iki molekülden birinin amino grubu ile diğerinin primidin azotu arasındaki karşılıklı H bağlarından birisinin daha kuvvetli olduğu, NH_2 ...N hidrojen bağının oluşumu nedeniyle, NH_2 bağ gerilme titreşimlerinin, monomerik yapıdaki frekanslara göre düşük frekansa kaymış olduğu saptanmıştır.

2-Aminoprimidin molekülünün monomerik ve dimerik formlarının hesaplanan spektrumları, katı fazda deneysel spektrum ile karşılaştırıldığında, dimerik formunun hesaplanan spektrumunun deneysel spektruma daha yakın olduğu saptanmıştır.

Institute : Graduate School of Natural and Applied Sciences
Programme : Physics
Department : Physics
Supervisor : Prof. Dr. Sevim Akyüz
Degree Awarded and Date : MSc – September 2013

ABSTRACT

STRUCTURAL INVESTIGATION AND VIBRATIONAL FREQUENCY CALCULATIONS OF DIMERIC FORMS OF AMINOPYRIMIDINE MOLECULES BY AB-INITIO DFT METHOD

Merve Akgün

Pyrimidine is the general name for all nitrogenous aromatic bases found as a parent compound generally in nucleic acids, many vitamins, as well as in coenzymes and antibiotics. Pyrimidines have wide occurrence in living organisms in nature as especially condensed derivative forms. Pyrimidine derivatives are used for treatment of illnesses such as hypertension, heart rhythm disorder and throat inflammation (angina). They are also used as antiviral compound in anti metabolites, in Zidovudine developed as an anticancer drug, in cosmetic sector, for treatment of wrinkles, tonifying hair roots, and strengthening epidermis layer to avoid formation of gray hair.

In this thesis, the lowest energy geometry and vibrational frequencies and of both monomeric and dimeric forms of 2-Aminopyrimidine molecule which has many biological functions, were calculated by using Gaussian 05 software with Density Function Theory (DFT) method, and 6-311++G(d,p) base set.

The symmetry point group of 2-Aminopyrimidine molecule varies depending on the angle between the ring and NH_2 planes. It was found that in the lowest energy conformation NH_2 group is not in the same plane with that of

aminopyrimidine ring, thus has C_S point group. It was found that in dimeric structure, one of the mutual H bonds, between the amino group of one molecule and the nitrogen of the other molecule appears to be stronger than the other. Moreover, in dimeric structure, due to $NH_2\dots N$ hydrogen bond formation, the NH_2 stretching vibrations are found to shift to lower frequency in comparison to those of monomeric structure.

The calculated IR spectra of dimeric form of 2-Aminopyrimidine molecules are found to be more close to the experimental IR spectrum of 2-Aminopyrimidine in solid phase in comparison to that of monomeric form.