

Programı: Fizik
Tez Danışmanı: Prof. Dr. Sevim Akyüz
Tez Türü ve Tarihi: Yüksek Lisans – Temmuz 2015

ÖZET

5-FLUOROURASIL MOLEKÜLÜNÜN SU KOMPLEKSLERİNİN TİTREŞİM FREKANSLARININ AB-INITO DFT YÖNTEMİ İLE HESAPLANMASI

ÇAĞLAR ÇAĞLAYAN

5-Fluorourasil ($C_4H_3FN_2O_2$) (5-Fluoro-1*H*,3*H*-pyrimidine-2,4-dione), molekülü en eski kemoterapi ilaçlarından biridir, ilk kez 1957 yılında sentezlenmiştir ve o günden beri katı tümörlerin tedavisinde kullanılmaktadır. Aynı zamanda urasil ve türevleri temel biyolojik süreçlerde önemli bir rol oynamaktadır.

Bu çalışmada, kanser tedavisinde ilaç olarak kullanılan 5-fluorourasil molekülünün yapısı, yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT), B3LYP fonksiyoneli ve 6-311++G(d,p) baz seti ile optimize edilmiş, en düşük enerjili moleküler yapısı saptanmıştır. Daha sonra mümkün su kompleksleri oluşturularak en düşük enerjili konformasyonları saptanmıştır. 5-Fluorasil monomerinin ve iki düşük enerjili su komplekslerinin optimize geometrik parametreleri kullanılarak titreşim frekans ve kipleri hesaplanmış ve sonuçlar deneysel kırmızı altı spektroskopik sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. Çalışmanın amacı fizyolojik ortamda bu molekülün davranışlarını incelemek için molekülün su ile yaptığı etkileşimleri saptamaktır.

Anahtar Kelimeler : 5-Fluorourasil, Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi , H₂O-kompleksleri.

Institute: Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department: Physics

Programme: Physics
Supervisor: Prof. Dr. Sevim Akyüz
Degree Awarded and Date: M.Sc.– July 2015

ABSTRACT

THE CALCULATION OF THE VIBRATIONAL FREQUENCIES OF THE 5-Fluorourasil MOLECULE'S H₂O COMPLEXES BY AB-INITIO AND DENSITY FUNCTIONAL METHODS

ÇAĞLAR ÇAĞLAYAN

5-Fluorourasil (C₄H₃FN₂O₂) (5-Fluoro-1*H*,3*H*-pyrimidine-2,4-dione), is one of the oldest chemotherapy drugs, was first synthesized in 1957 and it is being used since then for the treatment of solid tumors. Also, uracil and derivatives play important role in basic biological processes.

In this study the molecular structure of the anticancer drug, 5-fluorouracil molecule, was optimized by using Density Functional theory, B3LYP functional and 6-311++G(d,p) basis set and the most stable geometry was determined . Afterwards, the possible water clusters of the molecule were formed and their energetically preferred conformations were investigated. The optimized structural parameters of the most stable monomer and two low energy water clusters were used in the vibrational wavenumber calculations. The vibrational wavenumbers and modes were calculated and compared with experimental IR spectra of solid 5-fluorouracil. The aim of this study is to investigate the interaction of 5-fluorouracil with water molecules in order to elucidate behaviors of the biological active molecule in physiological medium.

Keywords : 5-Fluorourasil, Density Functional Theory , H₂O-clusters.

1. GİRİŞ