

Enstitüsü : Fen Bilimleri
Programı : Fizik
Danışmanı : Prof. Dr. Sevim Akyüz
Tez Türü ve Tarihi : Yüksek Lisans – Haziran 2010

KISA ÖZET

AMRİNONE MOLEKÜLÜNÜN TİTREŞİM FREKANS VE KIPLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONU TEORİSİ (DFT) YÖNTEMİ İLE HESAPLANMASI

Berna Atak

Kalp yetmezliği bulgularının tedavisinde, kalp performansının artması önemli bir hedefdir. Hastalarda uzun süreli terapiler için; amrinone kullanılmaktadır. Amrinone, bir sentetik bipyridin fosfodiesteraz inhibitörüdür ve kalp yetmezliğinde kalp kaslarının güçlendirilmesi için kullanılır. Kalp yetmezliği tedavisindeki büyük önemine rağmen bugüne dek amrinone üzerinde konformasyon analizi yapılmamıştır, teorik veya deneysel titreşimsel spektroskopi çalışması yayınlanmamıştır. Biyolojik aktif moleküller, aktivitelerini en düşük enerjili konformasyonda (“global” konformasyon) yaptıkları için, bu moleküllerin konformasyon analizi önemlidir ve yapı-fonksiyon ilişkileri hakkında bilgi verir.

Bu çalışmada, amrinone molekülünün titreşim frekans hesapları ve geometri optimizasyonu “Gaussian 03” programında hesaplanmıştır. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT), 6-311G++(d,p) baz seti seçilerek kullanılmıştır. Geometri optimizasyonu, bu molekülün düzlemsel olmayan bir geometrisinin olduğunu ortaya çıkarmıştır. Piridin halkaları arasındaki torsiyon açısı 28.18° bulunmuştur. FT-IR ($4000-400\text{ cm}^{-1}$) ve Raman ($3800-50\text{ cm}^{-1}$) spektrumu kaydedilerek, deneysel dalga sayısı değerleri ile teorik dalga sayısı değerleri karşılaştırıldı. Titreşimsel kiplerin tanımları verildi.

Anahtar Sözcükler: Amrinone, Ab-İnitio, Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT), IR ve Raman spektroskopi, Titreşim dalgasayıları

IKU
KÜTÜPHANESİ

Institute : Graduate School of Natural and Applied Sciences
Programme : Physics
Supervisor : Prof. Dr. Sevim Akyüz
Degree Awarded and Date : MSc – June 2010

ABSTRACT

CALCULATIONS OF VIBRATIONAL FREQUENCIES AND MODES OF AMRINONE MOLECULE BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) METHOD

Berna Atak

Improvement of cardiac performance is a major objective in the treatment of symptomatic congestive heart failure. Amrinone is used for long-term therapy in patients. Amrinone is a synthetic bipyridine phosphodiesterase inhibitor and it is used to provide inotropic support to the failing myocardium. Although its great importance in the treatment of congestive heart failure, up to our knowledge, conformational analysis has not performed, no experimental or theoretical vibrational study has been reported on amrinone. However, since biological active molecules perform their activity in global conformation, conformational analysis is important, and gives information function-conformation relationship.

In this study, geometry optimization and vibrational wavenumber calculations of free amrinone molecule have been carried out with the "Gaussian 03" program package. Density Functional Theory (DFT) method with 6-311G++(d,p) basis set has been used. The geometry optimization revealed non planar geometry. The torsion angle between the pyridine rings was found to be 28.18°. The FT-IR (4000-400 cm^{-1}) and Raman spectra (3800-50 cm^{-1}) of polycrystalline amrinone were recorded and experimental wavenumbers were compared with those of calculated. Approximate description of the vibrational modes was given.

Key Words: Amrinone, Ab-Initio, Density Functional Theory (DFT) Method IR and Raman Spectroscopy, Vibrational wavenumbers.