

## **Moleküler Modelleme ve Simulasyon: İlaç Tasarımı, Kanser, Diyabet ve Alzheimer**

**Prof. Dr. Fatih Yaşar**

**H.Ü. Mühendislik Fakültesi Fizik Mühendisliği Bölümü**

Biyolojik olayların altında yatan yapısal olaylar ve değişiklikleri modellenerek yapılan simülasyon çalışmalarla herhangi bir ilacın keşif sürecini önemli ölçüde ilerlettiği yapılan çalışmalar bilinmektedir. Bu teknikler ile bazı hücrenel reseptörlerin, taşıma proteinlerinin, kanser, Alzheimer, diyabet ve diğer hastalıkların anlaşılması ve potansiyel tedavisi ile ilgili enzimlerin mekanizmaları ayrıca araştırılmaktadır.

Bu bilgiler ışığında yapılacak olan bu sunumun ilk bölümü, moleküler modelleme için tanımlanan temel etkileşimler ve bu etkileşimleri tanımlayan farklı kuvvet alanlarını (Force-Fields) kapsayacaktır. İkinci bölüm, istatistik mekanik kuralları çerçevesinde incelenecek makromoleküller için kullanılacak simülasyon teknikleri vurgulanacak, Alzheimer, diyabet gibi hastalıkların anlaşılmasına yönelik yapılmış simülasyon çalışmalarını içerecektir.

İstatistik mekanik açıdan makromoleküllerin faz uzaylarının karmaşık yapıda olmasından dolayı simülasyon teknikleriyle elde edilen çok-boyutlu verilerin analizi ayrıca büyük önem taşımaktadır. Dolayısıyla sunumun son bölümünde ise serbest -enerji yüzeyleri (FES ya da FEL), temel bileşenler analizi (PCA), eş haritalama (isomap) gibi analiz teknikleri tartışılacaktır.