

PROJE TANIMI

Viral hastalıklar ciddi toplum sağlığı sorunlarına yol açmaktadır. Bunlardan birisi de Maymun Çiçeği hastalığıdır. Bu hastalığı tedavi etmek için özel bir ilaç bulunmamaktadır. İlaç keşifleri zorlu bir süreçtir. Bu süreci kolaylaştırmak için kimyasal yapıları graf teorisi ile modelleyerek, kimyasal yapıların fiziksel ve kimyasal özelliklerini tahmin edilmesi sağlanmaktadır.

Bir kimyasal yapının hidrojen içermeyen atomlarını grafın tepeleri, atomlar arasındaki bağları da grafın ayrıtları ile temsil edilir (Gutman, 1990). Bu grafların, graf parametrelere bağlı olarak elde edilen sayısal değerleri de topolojik indeksleridir. Topolojik indeksler grafın tepe derecesine, tepeler arası uzaklık gibi birçok parametreye bağlı olarak tanımlanır. Kimyasal grafların topolojik indeks değerleri ile SPSS gibi programlar kullanarak elde edilen denklemler kimyasal yapıların özelliklerini tahmin etmede kullanılır.

Bu çalışmada, Maymun çiçeği hastalığının tedavisinde kullanılan ilaçları graf ile modelleyerek dereceye bağlı bitişik olmayan tepe çiftlerin dereceye bağlı topolojik indekslerini hesaplamak ve bu sonuçları sayısal olarak karşılaştırmaktır. İlaç keşiflerinde ve tasarımlarında bu kimyasal yapıların türevlerinin deney yapmaksızın fiziksel ve kimyasal özelliklerinin tahminlerinde kullanılmasına hedeflenmektedir. .

PROJENİN KAPSAMI

❖ **Alan:** Matematiksel kimya, graf teorisi, topolojik indeksler

❖ **Hedef:** Maymun çiçeği virüsüne karşı kullanılan ilaçların kimyasal yapılarını graf teorisiyle modelleyerek yapısal analizini gerçekleştirmektir. Tablo 1 de bu ilaçlar ve özellikleri verilmektedir (PubChem, 2025).

İlaç Adı	Diğer Adı	Kimyasal Formül	Kullanım Alanı
Tecovirimat	TPOXX	$C_{19}H_{15}F_3N_2O_3$	Çiçek ve Maymun çiçeği tedavisi (FDA)
Cidofovir	Vistide	$C_8H_{14}N_3O_6P$	AIDS bağlı CMV retinit, orthopox virüsü
Brincidofovir	Tembexa	$C_{27}H_{52}N_3O_7P$	Çiçek hastalığı, geliştirme aşamasında
Valacyclovir	–	$C_{13}H_{20}N_6O_4$	HSV, uçuk, zona
Famciclovir	–	$C_{14}H_{19}N_5O_4$	Herpes simpleks enfeksiyonları
Acyclovir	–	$C_8H_{11}N_5O_3$	Suçiçeği, herpes zoster, yaraların iyileşmesi

Tablo 1. İncelenen İlaçlar ve Özellikleri

❖ **Yöntem:** İlaç molekülleri grafa dönüştürülür
Bitişik olmayan tepe çiftlerine bağlı coindeksler hesaplanır

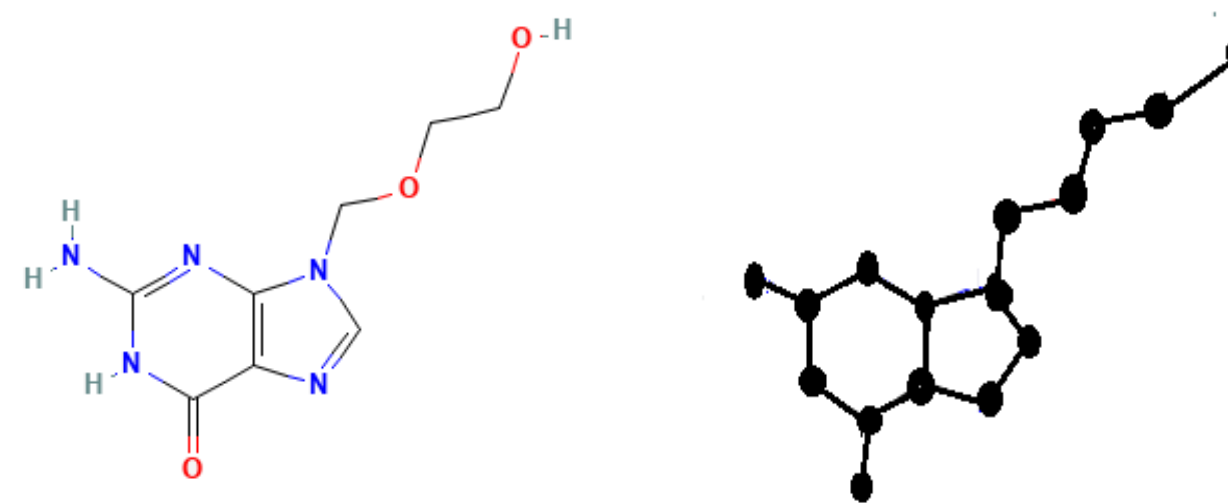
❖ MATLAB ile sayısal analiz ve karşılaştırma yapılır

❖ **Uygulama:** İlaçların fiziksel ve kimyasal özelliklerinin tahmini
Yeni ilaç tasarımlarına teorik veri sağlamak

❖ **Katkı:** Disiplinler arası (matematik, biyoteknoloji, eczacılık) bilimsel çalışmalara temel oluşturur.

PROJENİN AMACI

- Maymun çiçeği virüsüne karşı kullanılan antiviral ilaçların graf temsillerini oluşturarak topolojik indekslerini analiz etmek. Şekil 1 de Acyclovir ilacının kimyasal yapısı ve onun graf teori ile modellenmiş hali verilmiştir.



Şekil 1. Acyclovir ilacının kimyasal yapısı ve onun moleküler grafi

- Bitişik olmayan tepe çiftlerine bağlı coindeksleri hesaplamak.

- Bu indekslerin sayısal karşılaştırmalarıyla fiziksel-kimyasal özelliklerini tahmin etmek

- QSPR analizleri için temel oluşturmak

- Sonuçları karşılaştırarak deney yapılmadan ilaç tasarımı sürecine katkı sağlamak.

SONUÇ

❑ İlaçların coindeks değerleri hesaplanarak karşılaştırıldı.

❑ Bazı indeksler, fizikokimyasal özelliklerle yüksek korelasyon gösterdi.

❑ QSPR analizi için temel veri oluşturuldu.

❑ Bu yaklaşım, deneysel süreçlerin yerini alabilecek uygun teorik modellerin oluşturulabileceğini göstermiştir.

❑ Gelecekte benzer antivirallerin tasarımında rehber olabilecek nitelikte sonuçlara ulaşılmıştır

Kaynaklar

- Gutman I., A property of the simple topological index, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry. (1990) 25, 131–140.
- PubChem, “An open chemistry database at the national institutes of health (NIH),” 2021, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>