

35136

ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

35136

RFAMİD NÖROPEPTİDLERİNİN TEORİK
KONFORMASYON ANALİZİ

Lütfü DEMİR

Yönetici: Doç. Dr. Yusuf ŞAHİN

Doktora Tezi

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

ÖZET

Glu - Gly - Arg - Phe - NH₂, *Glu - Leu - Leu - Gly - Gly - Arg - Phe - NH₂* ve *Glu - Trp - Leu - Lys - Gly - Arg - Phe - NH₂* moleküllerinin konformasyon analizleri molekülün mekanik modeli gözönüne alınarak atom-atom potansiyellerinin yardımı ile yapılmıştır. Toplam enerji Van der Vals, elektrostatik, dönme ve hidrojen bağı enerjilerinin toplamı şeklinde belirlendi. Van der Vals karşılıklı etkileşme enerjisi hesaplanırken Lenard-Cons potansiyelinin polipeptidler için parametrelendirilmiş ifadesinden yararlanıldı. Elektrostatik karşılıklı tesir enerjisi, monopoll yaklaşımda atomların kısmi yükünün CNDO/2 kuantum mekanik yöntemle bulunmuş değerleri gözönüne alınmak suretiyle, dielektrik katsayısı polar ortam için belirlenerek hesaplandı. Dönme enerjileri deneysel sonuçlardan bulunan parametrelerin kullanılmasıyla hesaplandı. Hidrojen bağı enerjisi Morse potansiyel ifadesi kullanılarak hesaplandı. enerjinin minimumu "koşma gradiyentler metodu" ile bulundu.

Bu çalışma yapılırken önce φ ve ψ için herbir mono-peptidin enerji haritası çizildi. Bu haritanın çiziminde -180° ile 180° aralığında 20° lik adımlar kullanıldı. Bu enerji haritalarında en düşük enerjili durumlar en iyi seçenekler olarak tesbit edildi. Bu en iyi seçeneklerden mono-peptidler için konformasyon imkanları incelendi ve sonuçlar dipeptidlerin incelenmesinde kullanıldı.

Glu - Gly - Arg - Phe - NH₂ nöropeptid molekülünün *Glu¹ - Gly²* ve *Arg³ - Phe⁴ - NH₂* dipeptidleri ayrı ayrı incelendi. Bunların en düşük enerjili durumları tesbit edilerek molekülün tamamının konformasyonunda kullanıldı.

Mono-peptidlerin konformasyon imkanlarının incelenmesinden elde edilen düşük enerjili durumlar *Glu¹ - Leu²* ve *Glu¹ - Trp²* dipeptidlerin incelenmesinde kullanıldı. Dipeptidlerin hesaplanan sonuçlarından yararlanılarak *Glu¹ - Leu² - Leu³* ve *Glu¹ - Trp² - Leu³* tripeptidleri incelendi. Tripeptidlerin düşük enerjili durumlarından yararlanılarak *Glu¹ - Leu² - Leu³ - Gly⁴* ve *Glu¹ - Trp² - Leu³ - Lys⁴* tetrapeptidlerin konformasyon imkanları irdelendi. Daha Sonra, *Glu¹ - Leu² - Leu³ - Gly⁴ - Gly⁵ - Arg⁶ - Phe⁷ - NH₂* ve *Glu¹ - Trp² - Leu³ - Lys⁴ - Gly⁵ - Arg⁶ - Phe⁷ - NH₂* nöropeptid moleküllerinin tamamının uzay yapısı, adı geçen tetrapeptidlerin herikisi de *Arg⁶ - Phe⁷ - NH₂* dipeptidine *Gly⁵* mono-peptidi yardımıyla bağlanarak mümkün olan tüm variantların enerjilerinin minimizasyonu sonucu bulundu.

SUMMARY

Conformation analysis of *Glu - Gly - Arg - Phe - NH₂*, *Glu - Leu - Leu - Gly - Gly - Arg - Phe - NH₂* and *Glu - Trp - Leu - Lys - Gly - Arg - Phe - NH₂* molecules were determined as the summation of by means of the mechanical model of molecule using the atom-atom potential Van der Waals, electrostatic, rotation and hydrogen bond energies. Parameterized expression of Lenard-Cons potential has been used while Van der Waals interaction was being calculated. Electrostatic interaction energy has been calculated by considering the dielectric coefficient for polar medium determined by using the CNDO/2 method of quantum mechanical monopole approximation using partial charge values of atoms. Rotational energies were determined by using the parameters obtained from experimental results. Hydrogen bond energy was calculated due to Morse potential expression. The minimum values of energy were found with "the complex conjugate gradient method"

In this study, the energy map for each mono-peptide has been drawn in the range of -180° and 180° by the steps 20° . The best variant are decided from these maps. Conformation facility for mono-peptides were examined from these best choosing and the results were used in the examination of dipeptides. *Glu¹ - Gly²* and *Arg³ - Phe⁴ - NH₂* dipeptides of *Glu - Gly - Arg - Phe - NH₂* neuro-peptide were examined separately. The most convenient alternation of these were determined and used in the conformation analysis of the whole molecule.

The low-energy states obtained from analysis of conformation facility of mono-peptides were used in the examination of *Glu¹ - Leu²* and *Glu¹ - Trp²*. *Glu¹ - Leu² - Leu³* and *Glu¹ - Trp² - Leu³* tripeptides were examined by using the calculated results of dipeptides. Conformation facility of *Glu¹ - Leu² - Leu³ - Gly⁴* and *Glu¹ - Trp² - Leu³ - Lys⁴* tetrapeptides were examined by using the low-energy values of the tripeptides. Then, the space structure of *Glu¹ - Leu² - Leu³ - Gly⁴ - Gly⁵ - Arg⁶ - Phe⁷ - NH₂* and *Glu¹ - Trp² - Leu³ - Lys⁴ - Gly⁵ - Arg⁶ - Phe⁷ - NH₂* neuro-peptides were found as the result of minimization of energies possible variant by binding both tetrapeptides stated above to *Arg⁶ - Phe⁷ - NH₂* dipeptide by means of *Gly⁵* mono-peptide.

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli görüş ve yardımlarını esirgemeyen tez hocam sayın Doç. Dr. Yusuf ŞAHİN'e, Doç. Dr. Nagif SEFTEROĞLU'na ve İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Prof. Dr. Niftalı GOCÁ'ya en içten şükranlarımı arz ederim.

Bu tez çalışmasında yer alan bilgisayar analizlerinde her türlü desteği veren Arş. Gör. Abdulhalik KARABULUT, Arş. Gör. Gökhan BUDAK ve Arş. Gör. H. Salih GÜDER'e, ayrıca bu tezi yapmama fırsat veren Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü yetkililerine ve Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü elamanlarına da teşekkür ederim.

·Lütfü DEMİR



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	i
SUMMARY	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
1. GİRİŞ	1
2. TEORİ BİLGİLER	5
2.1 Giriş	5
2.2 RFamide Nöropeptidler	6
2.3 Polipeptid Zincirinin Konformasyonu	7
2.4 Yakın Karşılıklı etkileşmesi	8
2.5 Orta Karşılıklı Etkileşme	8
2.6 Uzak Karşılıklı Etkileşme	10
2.7 Teorik Konformasyon Analiz Metodu	11
2.7.1 Gayri-Valent Karşılıklı Etkileşme	12
2.7.2 Torsiyon Enerji	12
2.7.3 Elektrostatik Karşılıklı Etkileşme	13
2.7.4 Hidrojen Bağları	14
3. HESAPLAMALAR	15
3.1 $Glu - Gly - Arg - Phe - NH_2$ Molekülünün Teorik Konformasyon Analizi	15
3.1.1 Glu Monopeptidi	15
3.1.2 Gly Monopeptidi	16
3.1.3 Arg Monopeptidi	19
3.1.4 Phe Monopeptidi	19
3.1.5 $Glu^1 - Gly^2$ Dipeptidi	19
3.1.6 $Arg^3 - Phe^4 NH_2$ Dipeptidi	22
3.1.7 $Glu^1 - Gly^2 - Arg^3 - Phe^4 - NH_2$ Tetrapeptidi	22
3.2. $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3 - Gly^4 - Gly^5 - Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ Molekülünün Teorik Konformasyon Analizi	32
3.2.1 Leu Monopeptidi	32
3.2.2 $Glu^1 - Leu^2$ Dipeptidi	33
3.2.3 $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3$ Tripeptidi	33
3.2.4 $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3 - Gly^4$ Tetrapeptidi	33
3.3 $Glu^1 - Trp^2 - Leu^3 - Lys^4 - Gly^5 - Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ Molekülünün Teorik Konformasyon Analizi	76

3.3.1 <i>Trp</i> Monopeptidi	76
3.3.2 <i>Lys</i> Monopeptidi	77
3.3.3 <i>Glu</i> ¹ – <i>Trp</i> ² Dipeptidi	79
3.3.4 <i>Glu</i> ¹ – <i>Trp</i> ² – <i>Leu</i> ³ Tripeptidi	79
3.3.5 <i>Glu</i> ¹ – <i>Trp</i> ² – <i>Leu</i> ³ – <i>Lys</i> ⁴ Tetrapeptidi	79
4.. SONUÇ ve TARTIŞMA	110
5.. EKLER	111
6.. KAYNAKLAR	121



1. GİRİŞ

Basit yapıya sahip canlıların sinir sistemleri ve onu oluşturan elemanlar yüksek yapıya sahip canlıların sinir sistemlerine ve onu oluşturan elemanlara nazaran sadedir. Bu nedenle basit yapıya sahip ibtidai canlıların sinir sisteminin ve onun elemanlarının irdelenmesi canlıların yaşamını çok büyük ölçüde etkileyen bir çok problemlerin incelenmesinde ilk kademe olarak kabul edilmektedir. İmin farklı alanlarında elde edilmiş sonuçlar, sinir sisteminin oluşmasında ve faaliyet göstermesinin temelinde kesinlikle nöropeptidlerin olduğunu göstermektedir. Sinir sistemlerinin esas elemanlarının reseptörlerinde polipeptid tipli moleküllerden oluşması bu moleküllerin uzay yapısının incelenmesinin moleküler fiziğin ve biyolojinin en önemli problemi yapmıştır.

Nöropeptidlerin yapısı hakkındaki bilgiler, sinir sisteminin faaliyetini modelleştirme açısından çok önemlidir. Polipeptidler çeşitli moleküler ağırlığa sahip ve bir kaide olarak 20 tip amino asit artıklarının kimyasal bağlanmasından oluşan biyomoleküllerdir. Canlı organizmada yer almakta olan tüm olaylar doğrudan veya dolaylı olarak peptidlerin yardımıyla meydana gelmektedir. Farklı amino asitlerle beraber bir çok küçük bileşenleri de içeren peptidlerin çok farklı kimyasal yapıya sahip olması gözlenmektedir. Çoğu zaman, molekülü oluşturan amino asitlerin sayısına göre polipeptidleri oligopeptidlere ve proteinelere ayırmaktadırlar. 50-60'dan fazla amino asit artığının oluşturduğu polipeptid zincirine sahip moleküller protein olarak adlandırılmaktadırlar. Bu tip moleküllerden daha çok incelenenleri biyolojik katalizörlerdir (fermentler). Canlı organizmada maddelerin çevrilmesini düzenleyen ve biyolojik reaksiyonların hızını ayarlayan fermentlerin çeşitli fonksiyonları yerine getirme hızı ve başarısı çok yüksektir. Herbir durumda en mükemmel mekanizmayı oluşturan bu bileşenlerin faaliyeti için, yalnız kimyasal yapının yeterli olması deney sonuçlarından ortaya çıkmaktadır. Çeşitli fiziksel, kimyasal ve biyolojik irdelemeler sonucu, polipeptidlerin uzay yapısının, kimyasal yapısı kadar önemli olmasının gerekliliği meydana çıkmaktadır. Basınç, sıcaklık, kuvvet, alan gibi dış etkilere çok hassas olan uzay yapısı herbir molekülün fonksiyonlarını açıklamak için gerektiğinden, çeşitli metodlarla polipeptidlerin uzay yapısının incelenmesi ve bu yapının özelliklerle ilişkisinin açıklanması moleküler biyolojinin, moleküler fiziğin dolayısıyla da diğer yakın bilim alanlarının en önemli problemlerinden biridir. Bu hedefe ulaşmak için kullanılan çok sayıda fizikî-kimyevi deneysel yöntemler içerisinde daha geniş bilgiler elde etmeye imkan sağlayan X-ışını analizidir.

Teknolojinin gelişmesi ile, çeşitli polipeptidlerin düzgün yapıya sahip temiz kristallerinin elde edilebilmesi sonucu daha büyük hız kazanan bu çalışmalarda yüzlerce protein molekülünün uzay yapısı açıklanmıştır. Çok sayıda araştırmacıların ilgisini çekmek ve onlara hizmet etmek için proteinlerin bir "Uluslararası X- Işını Yapı Analizi Bilgiler Bankası" (Birnstein, et al., 1977) kurulmuştur. Bu kurumda toplanan sonuçların sayısı 1990' larda basında 1000' e ulaşmıştır. Özel bir bilgisayar programının yardımıyla, molekülün fonksiyonel özellikleri ve geometrik yapısıyla ilgili tüm bilgiler elde edilebilmektedir.

Polipeptid moleküllerinin X- ışını yapı analizinin hedefi geometrik parametrelerin (kimyasal bağ uzunluklarının, yapı elemanlarının ve en uğurlu (iyi) durumunda ayrı ayrı atomların kartezyen koordinatlarının) bulunmasıdır. H- atomlarının düşük saptırma özelliği ile ilgili koordinatları bulunabilmemektedir. X ışınlarının kristalden kırınım sonucu elde edilen elektron bulutu yoğunluğunun haritasının yardımıyla ayrı ayrı atomların dolayısıyla da tüm peptidlerin yapısının belirlenmesi yöntemleri detayıyla çeşitli referanslarda (Milburn., 1975; Herdriekson ve Konnert., 1980; Jones., 1982) bulunabilir.

Son senelerde NMR yönteminin peptidler ve proteinlerin uzay yapısının incelenmesinde geniş yer aldığı gözlenmektedir.

Tüm çeşitliliği ve özelliğine rağmen her bir biyolojik sistem ve onu oluşturan biyolojik moleküller fiziki sistem olmaktadır; yani, tüm özellikleri onları oluşturan atom çeşidine bağlı olmaktadır. Biyolojik moleküllerin uzay yapısı da belli fiziki ve kimyevi kurallar temelinde oluşmaktadır. Bu demektir ki, prensip olarak biyomoleküllerin uzay yapısını ve bu yapının biyolojik aktiflikle ilgisini fiziki-kimyevi kanunların temelinde aydınlatmak ve önceden söylemek mümkündür. Çok sayıda atomlardan oluşan polipeptidler, proteinler için bu problemin çözümü, çok zor olsa da, deneysel sonuçların sistemleştirilmesi ve eksikliklerin giderilmesi gerektiğinden, çağdaş moleküler fiziğin en önemli meselelerinden biri olmaktadır. Bu yönde görülen çalışmaların hepsi deney sonucu ve genel kanunlar temelinde Lumry ve Eyring (Lumry ve Eyring, 1954) tarafından teklif edilmiş üç ilkeye dayanmaktadır.

1. Tabii uzay yapısı, polipeptid molekülünün serbest enerjisinin minimumuna karşılık gelmektedir.
2. Polipeptid zincirin uzay yapısını oluşturması ardıcıl, yönlü, hatasız bir işlemdir.
3. Polipeptidin biyolojik aktif uzay yapısı, uygun fiziki kimyevi ortamda tamamen amino asit ardıcılığı birinci yapısı ile belirlenmektedir.

Bu iddiaların doğruluğunu tastikleyen deneyler ilk olarak Anfinsen ve arkadaşları tarafından yapılmıştır (Anfinsen, et al.,1961), Anfinsen (1973), Tamuchi ve Anfinsen (1971). Bu deneylerde ribonükleazanın kimyasal bileşenlerin etkisi ile denatürize olunmuş uzay yapısının, danatürize edici faktör aradan kaldırılırken kendiliğinden doğal durumuna döndüğü müşahade edilmekte idi. Böyle bir olaydan sonra ribonükleazanın biyolojik aktifliğinde hiçbir değişiklik meydana gelmemiştir. Yapının esas elemanları olan ve denatürasyon sonucu tamamen bozulan disülfid bağlar düzgün doğal kaidede yeniden yapılmaktaydı. Laboratuvarlarda doğal olmayan şartlarda sentez edilmiş ribonükleazanın hücrelerde sentez olunmuş ribonükleaza ile aynı özelliklere ve biyolojik aktifliğe sahip olması, onun asit ardıcılığının, molekülün uzay yapısını ve dolayısıyla biyolojik faaliyetini tayin ettiği kanaatini getirmiştir (Cutty ve Merrifield, 1969).

Bu deneylerde, sentezlenen molekülün, tabii (nativ) uzay yapısını bulması için uygun şartlar oluşturulurken 10^{-3} saniyeden az zaman gerektiği görünmekteydi. Deney sonuçların ve müşahade edilen tabii olayların açıklanması sonucunda Anfinsen (Anfinsen, 1973) tüm molekülün tabii yapısının oluşmasının yakın amino asitlerin oluşturduğu ve ayrı ayrı "kısımların; yapı taşları" olarak adlandırılabilen amino asit artıklarının yerel (local) yapılarını tayin eden elemanların araya gelmesi ile başladığını iddia etti. Bu elemanlar deney sonuçlarında da ortaya çıkan sağ veya sol α spiraller, π spiral, 3_{10} spiral, β yaprak, β eğilmeler olabilmektedir (Schulz ve Shirmer1982). İkinci yapı adı verilen bu elmanların geometrik parametreleri aynı tipler için yakın değerlere sahip olmaktadır. Deney sonuçları, belli amino asit ardıcılığının bu veya öteki türlü ikinci yapıları oluşturmaya meyilli olduğunu ortaya çıkarmaktadır. İkinci yapıların ortaya çıkabilme ihtimalini amino asit ardıcılığının temelinde hesaplayarak, proteinlerin uzay yapısını belirleme gayreti ile meydana gelen ilk çalışmalar (Blaut, et al., 1960; Blaut ve Stahman.,1962) belli sonuçlar verse de bu problemin çok zor olduğunu ve çoğu zaman deneysel bilgilerin ampirik kurallar elde etmeye imkan sağlamadığı görülmekteydi. Geçen 30 sene süresinde farklı yönlerde geliştirilmeye gayret edilen bu yöntemler, bir çok mesafe alınmasına rağmen, moleküllerin fizikokimyevi özellikleri ve yapısının yerine getirdiği fonksiyonlarla ilişkisini açıklayacak detaylı sonuçlar vermemektedir (Wallace, et al., 1986). Böyle bilgileri verebilecek ve belirli fizik kanunlarının temelinde oluşturulmuş yöntemler, molekülün içerdiği atomların karşılıklı etkileşme enerjisinin minimize edilmesine dayanmaktadır. Şöyle ki, tüm fiziki sistemler gibi biyolojik moleküllerin de tabii yapısı onu oluşturan atomların ve onu saran ortamın atomlarının sahip olduğu toplam enerjinin mini-

mum olduğu termodinamik dengeli duruma karşılık gelmelidir. Çok sayıda atomdan oluşan sistemin toplam enerjisinin tüm serbestlik derecelerine göre minimizasyonu zor bir problem olmaktadır. Bu problemi çözmek için farklı yaklaşımlar kullanılsa da polipeptid moleküllerinin uzay yapısının incelenmesinde olumlu sonuçlar elde etmeye imkan sağlayan yöntem kademeli yaklaşım yöntemidir. Bu yöntem de ilk kademede, yüzlerce atomdan oluşmuş molekülün küçük kısımlara bölünmesi ve herbir kısmın toplam enerjisinin minimum değerine karşılık gelen yapısının geometrik parametrelerinin bulunması öngörülmektedir. İkinci kademede, bu parametreleri kullanarak daha çok atom içeren kısımların toplam enerjisinin minimizasyonu için başlangıç değerler oluşturulur. Böylelikle herbir kademede önceki kademelerde incelenmiş kısımların düşük enerjili yapılarının geometrik parametrelerinin değerlerinin kombinasyonları kullanılarak daha büyük parçaların irdelenebilir yapılarının sayısının sınırlanması hedefe ulaşmaya imkan sağlamaktadır. Polipeptidler için böyle bir yaklaşım ve onun yerine getirilmesi için gereken fiziki modelin (Popov ve Melnikov., 1979) uygulanması, çeşitli özelliklere ve amino asit ardıcılığına sahip polipeptidlerin uzay yapısının detaylı incelenmesi ve deney sonuçlarına uymakta olan değerlerin bulunmasını mümkün kılmıştır.

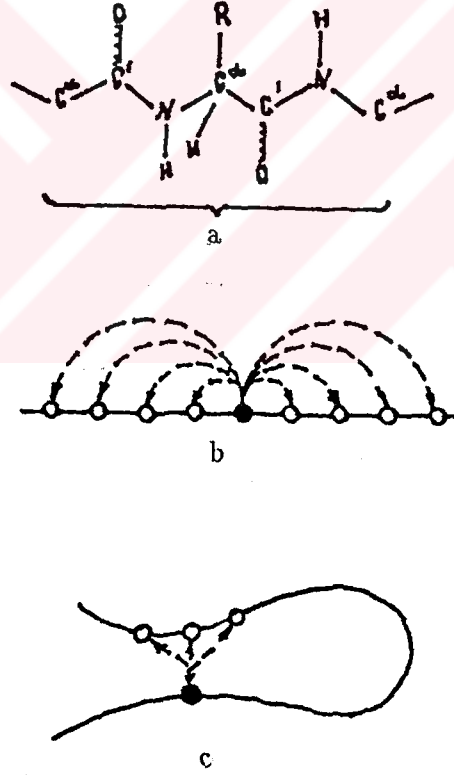
Bu yöntem tamamen apriordur; yani, polipeptidin uzay yapısının bulunması kesin olarak amino asit ardıcılığının temelinde tayin edilmektedir. Hesap modelinde kimya-sal bağ oluşturmeyen atomların karşılıklı etkileri gözönüne alınmaktadır ve toplam enerjinin değerlendirilmesi yarıampirik konformasyon analizi temelinde doğrulanmaktadır (Kitaygorodski, 1960, 1961; Burkert ve Ellinger, 1986; Iliel, et al., 1969).

Glu - Gly - Arg - Phe - NH₂, *Glu - Leu - Leu - Gly - Gly - Arg - Phe - NH₂* ve *Glu - Trp - Leu - Lys - Gly - Arg - Phe - NH₂* nöropeptidlerinin uzay yapısı Teorik Konformasyon Analiz Metodu yardımıyla bulundu. Atom-atom potansiyellerinin yardımı ile toplam enerji, Van der Vals, elektrostatik, dönme, ve hidrojen bağı enerjilerinin en iyi durumlarına karşılık gelen kararlatıcı enerjileri tablolar halinde verildi.

2. TEORİK BİLGİLER

2.1 Giriş

Kademeli hesaplamann sistemliliğini sağlamak için, polipeptid zincirinde yer almakta olan atomlar arasında karşılıklı etki yakın, orta ve uzak tipli olarak üç kısma ayrılmıştır. Yakın karşılıklı etki enerjisi denilirken, herbir monopeptidin atomlarının birbiri ile etkileşmesi sonucu ortaya çıkan enerji (Şekil 1a) kabul edilmektedir. Orta karşılıklı etki enerjisi (Şekil 1b) denilince birinci yapıda komşu olan nanopeptidlerin atomlarının karşılıklı etkileşme enerjisi gözönüne alınmaktadır. Söz konusu herhangi bir monopeptidin sağ ve sol taraflarında yer alan dörder amino asit artıkları ile etkileşmesidir. Birinci yapıda, birbirinden uzakta yer almakta olan monopeptidlere ait atomların (Şekil 1c) karşılıklı etkileşme enerjisi uzak karşılıklı etkileşme enerjisi olarak kabul edilmektedir.



Şekil 1. Polipeptidlerde aminoasit artıkları arasında (a) yakın, (b) orta, (c) uzak karşılıklı etkileşme.

Karşılıklı etkilerin bu şekilde sınıflandırılması, kademeli hesap fiziki yaklaşımını belirlemektedir. Böyle bir hesabın doğru sonuç verebilmesi için her üç tip karşılıklı etkinin birbirine uyması gerekiyor. Yani uzak karşılıklı etkiye göre elverişli olan durumlar, orta karşılıklı tesirin elverişli olduğu durumları içersin ve sonuncu yakın karşılıklı etkiye aykırı olmasın. Yalnız böyle bir durumda çok sayıda mümkün varyantların seçilmesi ve pratik hesaplama yapılacak sonlu sayıda irdelenmesi gereken yapıların gözönünde tutulması mümkündür.

2.2 RFamide Nöropeptidler

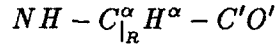
(*Glu - Trp - Leu - Lys - Gly - Arg - Phe - NH₂* Pol-RFamide) peptidi bir nöropeptid olup (*Glu - Leu - Leu - Gly - Gly - Arg - Phe - NH₂* Pol-RFamide) (ki, bu polyorchis'ten elde edilen ilk nöropeptidtir) ve (*Glu - Gly - Arg - Phe - NH₂* Antho-RFamide) (ki, bu deniz anası ve sea pansies'den elde edilen bir nöropeptidtir) ile birlikte bir peptid ailesi teşkil eder. RFamide ailesi olarak adlandırılan bu aile kinitlilerde(coelenterate) üç isim altında gruplandırılmaktadır(Grimmelikhuijzen, et al., 1992). Bunlar Pol-RFamide I, II ve Antho-RFamidtir. Bu gruptaki her bir nöropeptid kinitlilerin sinir sisteminde önemli fonksiyonlara sahiptir. Bu grupların yapılarının birbiriyle alakalı olması ve bunların bir peptid ailesi oluşturması, bu peptidler kodların DNA sıralamasının kalıtsal genlerden çözümlenebileceği fikrinin doğmasına yol açmıştır.Bunlar biyokimyasal araştırmalar sonucu deniz hayvanlarından Anthopleura elegantissima'nın DNA serisinden istifadeyle elde edilmiştir (Cornelia, et al., 1992).

Pol-RFamid II nin biyolojik faaliyeti henüz bilinmemektedir. Ancak bunun yapısının diğer iki peptidinkine çok benzer olması bunun da onların oynadığı biyolojik rolleri oynaması şeklinde bir beklentiye sebebi olmaktadır. Antho-RFamide (*Glu - Gly - Arg - Phe - NH₂*) bütün kas gruplarında hareketliliğin frekansını artırır (McFarlane, et al., 1987).

Bu nöropeptidlerin yapısının ve fizyolojik aktifiğinin farklı alanlarda irdelenmesi, primitif(ilkel) sinir sistemlerinin faaliyet ve yapı karmaşıklığının çözümlenmesinde önemli bir adım sayılmaktadır(McFarlane, et al., 1993).

2.3 Polipeptid Zincirinin Konformasyonu

Molekülün konformasyonu denilirken, kimyasal yapısı bozulmadan, atomlar arası bağlar etrafında dönmeler sonucu elde edilen çeşitli uzay yapıları anlaşılır. Çok atomlu polipeptidlerde bu yapılar, bir kaide olarak, bir kat kimyasal bağlar etrafında dönmeler sonucu olarak incelenmektedir. Bu yapıların birmanalı değerlendirilmesi için biyokimyevi komisyon (IUPHC-IUB Commission on Biochemical Nomenclature) tarafından genel kurallar kabul edilmiştir. Kabul edilmiş kurallara göre, serbest durumda amino asit oluşturan her bir atom grubu polipeptid zincirde mono-peptid olarak adlandırılan bir birim oluşturmaktadır. Mono-peptidlerin zincir oluşturan kısmındaki atomlar



şeklinde işaret edilmiştir. Mono-peptidin NH atom grubu ile başladığı ve $C'O'$ grubu ile sona erdiği kabul edilmektedir. Herhangi iki atomun oluşturduğu kimyasal bağlar etrafında dönmeleri değerlendirmek için, bağı oluşturan atomların oluşturduğu diğer iki bağı yerleştiği durumların arasındaki iki kat açılar parametre olarak alınmaktadır. Eğer herhangi dört atom ($A - B - C - D$ atomu) sırasıyla kimyasal bağ oluştursa $B - C$ etrafında dönmeler ABC atomlarının yerleştiği düzlemle BCD atomlarının yerleştiği düzlem arasındaki ikikat açı ile değerlendirilmektedir. Atomların hepsinin bir düzlem üzerinde olduğu yapılar A ve D atomları B ve C' nin oluşturduğu doğrultunun aynı tarafında olurken cis konformasyon, çeşitli taraflarında olursa trans konformasyon olarak adlandırılmaktadır. Cis konformasyon iki kat açının değerinin sıfıra eşit olduğu durum olarak kabul edilmiştir. Trans konformasyon da açı 180° dir. D atomunu BC eksenini etrafında saat akrebinin hareketi yönünde, cis konformasyondan trans konformasyona kadar döndürürken açının 0° dan 180° 'ye kadar artmış, saat akrebinin hareket yönünde döndürürken ise 0° dan -180° kadar azalmış oluruz. Amino asit artıklarının radikallerinin yan zincir olarak adlandırılması kabul edilmiştir. Yan zincirdeki atom grupları sırasıyla β , γ , δ , ϵ olarak işaretlenmektedirler.

Aynı komisyonda polipeptid zincirinin birinci, ikinci, üçüncü ve dördüncü yapıları da tanımlanmıştır. Birinci veya ilkin yapı denilirken polipeptid zincirini oluşturan amino asit artıklarının molekülü oluştururken almış oldukları diziliş ardıcılık, ikinci yapı denilirken ardıcılıkta yakın yerleşmiş artıkların oluşturduğu yapı birimleri; α - spiral, β - bükülme vs., üçüncü yapı denilirken bir zincirin tümününün uzay yapısı, dördüncü denildiğinde ise farklı polipeptid zincirlerin oluşturduğu uzay yapısı anlaşılmaktadır. İlkin yapıda amino artıklarının aldıkları yere göre numaralanması NH başlangıç kabul edilerek yapılmaktadır.

Aynı kurallara göre polipeptid zincirinin genel geometrisi $N_i-C_i^\alpha$ bağı etrafında dönme açısı φ_i , $C_i^\alpha-C_i'$ bağı etrafında dönme açısı ψ_i ve iki amino artığı birleştiren $C_i'-N_{i+1}$ peptid bağı etrafında dönme açısı ω_i belirlemektedir. Yan zincirlerdeki ikikat açılarını $\chi_i^1, \chi_i^2, \chi_i^3$ olarak işaretlenmesi kabul edilmiştir.

φ_i 'nin hesaplanması $C_{i-1}'-N_i-C_i^\alpha-C_i'$ grubunun, ψ_i 'nin hesaplanması $N_i-C_i^\alpha-C_i'-N_{i+1}$ grubunun, ω_i hesaplanması ise $C_i^\alpha-C_i'-N_{i+1}-C_{i+1}^\alpha$ grubunun sis konformasyonları başlangıç kabul edilerek yapılmaktadır. Her üç durumda açılarının artma yönü olarak NH grubundan bakıldığında, saat ibrelerinin hareket yönü kabul edilmiştir. χ_i^1 açısının hesaplanması $N_i-C_i^\alpha-C^\beta-X^\gamma$ (X amino asidinin tipine bağlı olarak C, O, S olabilir.) grubunun sis konformasyonları başlangıç kabul edilerek yapılmaktadır.

2.4 Yakın Karşılıklı Etkileşmesi

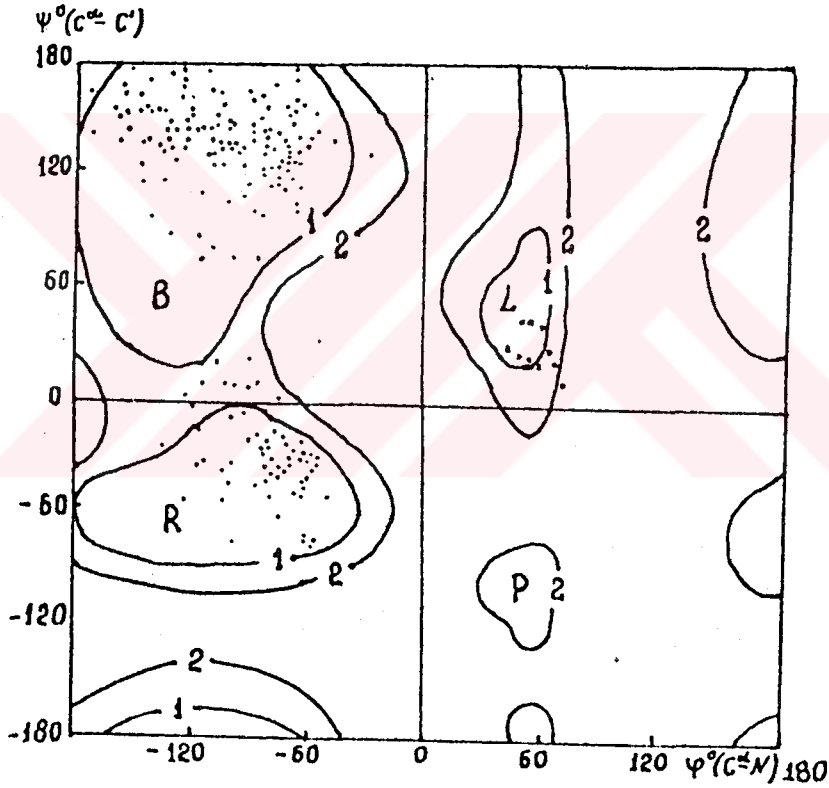
Bağ uzunluklarının ve valent açılarının değişmediği halde herbir monopeptidin durumu ϕ, ψ ve χ açılarının değerlerine göre bir manalı tayin edilmektedir. Monopeptidin konformasyon özellikleri ϕ ve ψ açılara göre kurulmuş haritalarda detaylı olarak görülmektedir. İlk olarak Ramachandran ve arkadaşları (Ramachandran, et al., 1963) tarafından sert küre şeması temelinde kurulmuş olan bu haritalarda düşük enerjili duruma karşılık gelen alanların miktarı monopeptidin yan zincirinin türüne bağlı olarak değiştiği görülmekteydi. Genel olarak bu alanları birbirlerinden yüksek enerjili şeritlerle ayrılmış B, R, L, P kısımlarına ayırmak kabul edilmektedir (Şekil 2).

Sonradan çeşitli potansiyellerle yerine getirilmiş hesaplamalar N-asetil- α amino asitlerin konformasyon imkanlarının detaylı açıklanmasına imkan sağlamıştır. Teorik hesaplamalar sonucu elde edilmiş değerler, deneysel olarak belirlenen geometrik parametrelerin değerleri ile uymaktadır (Scheraga, 1983).

2.5 Orta Karşılıklı Etkileşme

Monopeptidlerin konformasyon haritalarının irdelenmesi, yan zincirin uygun yönlenebilirliği gözönüne alınarak aynı ihtimalli düşük enerjili durumların sayısının onlarca olduğunu ortaya çıkarmaktadır. Monopeptidlerin farklı durumlarının enerjilik ve geometrik parametrelerinin kıyaslandırılmasından görüleceği üzere atomların elektron tabakalarının üst üste binmesi nedeniyle kuvvetli elektrostatik itme oluşmayan tüm durumlar aşağı yukarı aynı enerjiye sahip olmaktadır. Monopeptidlerden di-

ve tripeptid oluşturulurken bu düşük enerjili durumların kombinasyonlarından bir çoğu, yapı gerginliklerle ilgili olarak bir araya gelebilmektedirler. Dipeptidi oluşturan mono-peptidlerin düşük enerjili durumlarına karşılık gelen geometrik parametrelerin kombinasyonlarından toplam enerjinin minimizasyonu için başlangıç değerler olarak kullanıldığında, minimizasyon sonucu bir çok yapıların daha düşük enerjili duruma karşılık geldiği görülmektedir. Bu kaide ile mono-peptidlerde aynı ihtimalli olan konformasyonlar dipeptidlere çeşitli enerjilerle dahil olmaktadır. Yani yapıların enerjik açıdan elenmesi ortaya gelmektedir. Çok sayılı di- ve tripeptidlerin konformasyon analizi böyle bir elenmenin bir kaide olarak yer aldığını göstermektedir (Sasisekharan ve Ponnuswamy, 1971, Kreisler, et al., 1974, Oka, et al., 1989).



Şekil 2. N-asitil L-alanin metilamidinin konformasyon haritası ve himotripsin artıklarının konformasyon noktaları.

Düşük enerjili yapılarda monopeptidler arasında kararlaştırıcı temaslar yer almaktadır. Böyle temaslar oluşmadığında di- veya tripeptide dahil olan monopeptidlerin durumları düşük enerjili olsa da, oluşturdukları genel yapı düşük enerjililer sırasına dahil olabilmektedir. Kararlaştırıcı temaslar yan zincirlere dahil atomların arasında daha çok yer almakta ve bununla da bileşiğin konformasyon imkanlarının enerjinin değerine göre elenmesinde fragmenti oluşturan amino asidin tipinin önemli rolü görülmektedir. Yeni monopeptid eklenmesi sonucu bu elenmenin daha da kesinleşmesi çok sayıda amino asitten oluşan polipeptid molekülünün teorik konformasyon analizi için pratik imkan sağlamaktadır. Polipeptid zincirinin ve yan zincirlerin yönlerini tüm değişiklikleri ile düzenli şekilde irdelemek için ve çok sayılı amino asitten oluşan molekülün konformasyonunu bir değerli ifade etmek için özel bir sınıflandırma kabul edilmiştir. Bunlardan en pratiği (Akhmedov, et al., 1986) tarafından verilmiştir. Bu sınıflandırmada, monopeptidin konformasyon haritasında yer almakta olan $R(\phi, \psi = -180.00 - 0.00)$; $B(\phi = -180.00 - 0.00; \psi = 0.00 - -180)$; $L(\phi, \psi = 0.00 - 180.00)$; ve $P(\phi = 0.00 - 180.00; \psi = -180^\circ - 0.00)$ kısımlarına karşılık alanlara rastgelmesi ile ilgili ana zincirin farklı biçime sahip olabilmesi esas alınmaktadır. Öyle ki, polipeptid zincirinin komşu iki monopeptidinin karşılıklı yerleşmesine bağlı olarak, dipeptidin ana zincirinin iki genel durumu olmaktadır. *e* şekli olarak adlandırılan açılmış yapı $B - B, B - R, R - L, R - P, L - B, L - R, P - P, P - L$ kombinasyonlarında, *f* şekli olarak adlandırılan sarılmış yapı ise $R - R, R - B, B - L, B - L, B - P, L - L, L - P, P - R, P - B$ kombinasyonlarından oluşmaktadır. Bu sınıflandırma, polipeptid zinciri için genel karaktere sahiptir ve çok sayılı monopeptidlerin irdelenmeli olan konformasyon imkanlarını düzenleme açısından çok önemlidir.

2.6 Uzak Karşılıklı Etkileşme

Polipeptid molekülün biyolojik faallığını yerine getirmesi için kararlı uzay yapısı ile orta karşılıklı etkileşmenin oluşturduğu elemanların bir araya getirilmesi sağlanmaktadır. Bu olay birinci yapıda birbirinden uzakta yer almakta olan monopeptidlerin atomları arasında kararlaştırıcı temasların yer alması sonucu oluşmaktadır. Deney sonuçları onlarla amino asitten oluşan molekülün kesin belirlenmiş bir yapıya sahip olduğunu gösterdiğinden, uzak karşılıklı etkiler, ortak karşılıklı etkileşmenin oluşturduğu elemanların en elverişli kombinasyonlarını biraraya getirmelidir. Yani, orta ve uzak karşılıklı etkileşmeler arasında uyumluluk yer almaktadır. X-ışını sonuçları temelinde proteinlerin di- ve tripeptid parçalarının, böylece de diğer yerel (lokal) yapıların enerjik parametrelerinin hesaplanması; proteinin tabii uzay

yapısında yer almakta olan bu elemanların orta karşılıklı etkileşmeye göre en ihtimalli yapıya sahip olduğunu göstermektedir (Perezal, et al., 1993).

Orta ve uzak karşılıklı etkilerin uyumlu olması disülfid bağına sahip polipeptid zincirinde enerjinin minimizasyonunun sonucu disülfid köprülerin otomatik oluşması da doğrulamaktadır. Apamin (18 amino asit), tertiorin (21 amino asit) MSD-peptid (22 amino asit) moleküllerinin teorik konformasyon analizi disülfid köprülerin oluşma mekanizmasını açıklamak açısından da önemlidir (Popov ve Melnikov, 1979; Lomize, ve Popov, 1982, 1983). Bu molekülün her birisine 4 tane sistein amino asidi dahil olmaktadır. Apaminde $Cys^1 - Cys^{11}$ ve $Cys^3 - Cys^{15}$; tertiorin ve MSD-peptidde ise $Cys^3 - Cys^{14}$ ve $Cys^5 - Cys^{18}$ disülfid köprüsü oluşmaktadır. Hesaplamalar sistein amino asit artıklarının *SH* gruplarının uzayda birbiriyle reaksiyona girecek kadar yaklaşmasının ve düzgün kaidede köprüler oluşturabilmesinin ayrı ayrı kısımların ve yerel yapıların mümkün kombinasyonlarının enerjik elenmesi sonucu elde edilen tek bir variant mümkün olmaktadır. Ayrı bir deyimle, hem tüm molekül çapında hem de her bir küçük elemanda olaylar molekülün biyolojik faallığını temin eden uzay yapısının ve dolayısıyla disülfid köprülerin oluşmasını sağlayan yönde olmaktadır. Böyle bir işlem süresinde, ilkin yapıda yakın yer alan mono-peptidlerin bir kısmı sert yapıya sahip elemanlar oluşturur; bir kısmı ise esnekliği temin etmekle sert yapıların birbiri ile enerjik bakımdan en elverişli olan uzay yapısı oluşturmak için etkileşmesini temin etmektedir. Bu orta ve uzak karşılıklı etkilerin uyduğunu göstermektedir.

Böyle bir uyma 58 amino asitten oluşan PTI molekülü ile ilgili sonuçlarda da müşahade edilmektedir (Popov, et al., 1982, Goca ve Şahin, 1993).

2.7 Teorik Konformasyon Analiz Metodu

Polipeptidlerin uzay yapısının kademeli çözülmesi sırasında çok atomlu sistemin çeşitli enerjik ve geometrik parametrelerini değerlendirmek ve kıyaslamak gerekmektedir. Kuantum mekanik metodlardan yararlanarak onlarca atomdan oluşan bir sistemi çözmek imkansızdır. Bu nedenle polipeptidlerin, dolayısıyla da protein moleküllerinin küçük parçalarının uzay yapısının incelenmesinde, amprik modeller daha sıkça kullanılmaktadır. Böyle modellerden birisi de molekülün mekanik modelidir. Atomların elektron yapısı detaylı olarak gözönüne alınmayan bu model, esas olarak Born Oppenheimer yaklaşımına dayanmaktadır (Born ve Oppenheimer, 1927). Bu yaklaşıma göre molekülün toplam enerjisi çekirdeklerin koordinatlarına bağlı sürekli fonksiyon gibi tayin edilmektedir. Atomların sahip olduğu elektronlar ise çekirdekleri

etkileyen potansiyel alanlar oluşturmaktadırlar.

Polipeptidlerin incelenmesinde bir kaide olarak toplam enerji valent bağı oluşturmaya atomların etkileşmesini içeren valent olmayan, bir kat valent bağları etrafında dönmelerin frenlenmesini karakterize eden torsiyon, kimyasal bağ oluşturan atomların elektron tabakasının gayri simetrikliğinden kaynaklanan elektrostatik enerjilerinin ve hidrojen bağı enerjilerinin bağımsız toplamı şeklinde alınabilmektedir. Valent bağlarının ve valent açılarının değerlerinin değişmesi ile ilgili bozulma (deformasyon) enerjisinin gözönüne alınması da söz konusu olabilir.

2.7.1 Gayri-Valent Karşılıklı Etkileşme

Çözümlemesi gereken problemin türüne bağlı olarak gayri-valent karşılıklı etki potansiyelini çeşitli ifadeler kullanarak hesaplamak mümkündür. Potansiyelin deneysel sonuçlara uyumunu temin eden amprik parametrelerin sayısı da farklı alınabilmektedir. Ne kadar çok sayıda amprik parametre, potansiyelin açık yazılışına dahil edilirse, deneyle uyum sağlama imkanı o kadar artmış olur. Öteki yandan, potansiyele dahil olan parametrelerin çokluğu hesaplamalarda aşılabilir matematiksel zorluklar doğurmaktadır. Polipeptid moleküllerinin incelenmesinde bir kaide olarak Lennard-Cons'un iki parametrelili 6-12 potansiyelleri kullanılmaktadır. (Lennard-Jones, 1924). Bu potansiyel

$$E(R) = -\frac{A}{R^6} + \frac{B}{R^{12}} \quad (2.1)$$

şeklinde olup burada A ve B amprik parametreler, R ise atom çiftlerinin arasındaki uzaklıktır. Potansiyelin birinci terimi Van der Vals etkileşmesini, ikinci terim ise itmeyi karakterize etmektedir. Bizim hesaplamalarımızda bu potansiyeli için Scheraga ve arkadaşlarının teklif ettiği parametreler kullanılmıştır (Scott ve Scheraga 1966; Momany, et al., 1975).

2.7.2. Torsiyon Enerji

Atom-atom potansiyel temelinde gayri-valent karşılıklı etki hesaplanırken çiftlerin oluşturduğu valens bağlarının doğrultularının yönünün etkisi gözönüne alınmamaktadır. Deneysel incelemeler ise böyle bir etkinin belirli değerlere sahip olduğunu ve çoğu zaman bileşiğin konformasyon imkanlarının belirlediğini göstermektedir. Teorik çalışmalarda etkileşmenin bu kısmını tek kat valent bağları etrafında dönmeleri

frenleyen ve

$$E = \frac{E_0}{2}(1 \mp \cos n\phi) \quad (2.2)$$

şeklinde tayin edilen torsiyon enerjisi eklemekle dikkate almak mümkündür. E_0 enerji çeperinin (engelinin) yüksekliğini karakterize eden amprik parametre, ϕ - valens bağı etrafında dönme açısıdır. n parametresi atomun valent durumunu karakterize etmektedir. \mp işareti enerjinin ve açının değerlendirilmesindeki seçime bağlıdır. Bizim hesaplamalarda E_0 ve n değerleri Momany(Momany, et al.,1975) den alınmıştır.

2.7.3 Elektrostatik Karşılıklı Etkileşme

Molekülün mekanik modelinde atomların elektron bulutlarının etkileşmesini gözönüne almak için monopoll ve dipol-dipol yaklaşımı kullanılabilir. Çok sayıda atomlardan oluşan polipeptid moleküllerinde valent bağlarının doğrultuları arasındaki açıyı gözönüne almayı gerektiren dipol-dipol yaklaşımının uygulanması zor olduğundan, monopoll yaklaşım kullanılmaktadır. Bu yaklaşımda molekülün elektrostatik enerjisi çiftlerin etkileşmesinin bağımsız toplamı olarak

$$E = \sum_{i > j=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{\epsilon R_{ij}} \quad (2.3)$$

şeklinde tayin edilmektedir. Burada q_i ve q_j sırasıyla i . ve j . atomların bağ oluşturmaları ile ilgili elektron tabakasının bozulması sonucu ortaya çıkan kısmi yüklerdir; R_{ij} i . ve j . atomlar arasında uzaklık, ϵ ortamın etkin dielektrik katsayısıdır ve molekülü oluşturan atomların, dolayısıyla da ortamın tipine bağlıdır. Tüm biyolojik olaylar sulu ortamda meydana geldiğinden, polipeptidlerin fiziksel- kimyasal özelliklerinin incelendiği hesaplarda ϵ değeri polipeptid-su ortamına karşılık alınmalıdır. Suyun makroskopik dielektrik katsayısı 81, polipeptidlerin temelini oluşturan C, H, O, N, S atomlarından oluşan organik modellerin ve amino asitlerin dielektrik katsayısı ise 2-10 arasında değişmektedir. Öteki yandan atom çiftlerinin etkileştiği yerel atom makroskopik ortamdaki farklı dielektrik katsayısına da sahip olmaktadır. Polipeptidlerin atom-atom potansiyellerini kullanarak elektrostatik karşılıklı etkiyi hesaplarırken ϵ' nun değerini bir kaide olarak 10 civarında alınmasının deney sonuçlarına daha iyi uyduğu kabul edilmektedir. Bizim hesaplamalarımızda bu fikir esas alınmıştır. Atomların sahip olduğu kısmi yüklerin değeri ise (Momany, et al., 1975) den alınmıştır.

2.7.4 Hidrojen Baęları

Hidrojen baęlarının enerjisi Mors tipli olup

$$E = D(1 - \exp(-m\Delta r))^2 - D \quad (2.4)$$

potansiyeli ile deęerlendirildi (Morse, 1929). Burada, m deneyle uyum saęlamak için kabul edilen amirik bir parametre, D hidrojen baęını koparmak için gereken enerji (ayırışma), Δr - hidrojen baę enerjisinin maksimum olduęu durumdan sapmanın deęeridir. Bu parametrelerin deęerleri (Klotz ve Fransen, 1962)'dan alınmıřtır.



3. HESAPLAMALAR

3.1 *Glu-Gly-Arg-Phe-NH₂* Molekülünün Teorik Konformasyon Analizi

Tetrapeptid $Glu^1 - Gly^2 - Arg^3 - Phe^4 - NH_2$, konformasyon imkanları ve fiziksel-kimyasal özellikleri kesin olarak farklı olan amino asit artıklarından oluşmaktadır. Birinci yapıya dahil olan Glu^1 ve Arg^3 amino asit artıkları elektrik yüküne ve hareketli yan zincirlere sahiptirler. Bu yan zincirler farklı işaretli yüke sahip olduğundan Glu^1 ve Arg^3 'ün yan zincirlerinin oluşturacağı güçlü elektrostatik etki, molekülün tüm uzay yapısının kararlılığını etkileyecektir. Adı geçen asit artıklarının arasında yer alan ve yan zincirinin olmaması dolayısıyla hareketli ana zincire sahip olan apolar Gly^2 amino asit güçlü elektrostatik kontakların oluşmasına imkan sağlamaktadır. Diğer yandan, Glu^1 amino asidinin NH_2 grubunun da artı işaretli elektrik yüküne sahip olmasını gözönüne alınması gerekiyor. Bu, birçok durumlarda enerjik açıdan Arg^3 yan zincirinin Glu^1 yan zinciri ile etkileşmesinin elverişli olmamasına getirebilmektedir. Eğer molekülün sonundaki NH_2 grubunu da göz önüne alırsak, molekülün uzay yapılarının belirlenmesinde elektrostatik etkileşmenin kesin öneme sahip olduğunu kabul edebiliriz. Phe^4 amino asit artığı polar olmayan yan zincire sahiptir. Bunun yan zincirinde yer almakta olan benzol grubu Van der Vals etkileşmeler sonucu molekülün ana zincirinde veya yan zincirlerin atomlarının sayısının yoğunluğunun büyük olduğu yönde kararlaştırılmaktadır. Hidrojen atomlarının ve molekül içindeki polar (O, N) tipli atomların oluşturacağı hidrojen bağlarının da etkisi özel olarak irdelenmelidir.

Böylelikle, molekülün uzay yapısının ve farklı kararlı durumlar arasında mümkün olan geçişlerin incelenmesi sırasında farklı etkilerin uzlaşması imkanlarını irdelenmek gerekiyor. Bu nedenle ilk kademede ayrı ayrı amino asit artıklarının ve ana zincire yakın yerleşen atomların oluşturduğu sistemin konformasyon imkanlarının, ikinci kademeden komşu amino asitlerinin oluşturduğu dipeptidlerin, üçüncü kademede tüm molekülün irdelenmesi maksada uygun sayılmıştır.

3.1.1 *Glu* Monopeptidi

Glu- monopeptidinin konformasyon imkanlarının irdelenmesi φ ve ψ iki kat açılarına göre, yan zincirlerin iki kat açılarının torsiyon enerjisinin minimumlarına karşılık gelen değerlerinde, enerji haritası kurulması ile başlandı. φ ve ψ 'nin değerlerinin $[-180^\circ + 180^\circ]$ aralığında, 20° lik değişimlerine karşılık mono-peptidin enerjileri he-

saplanarak tablolar hazırlandı. Monopeptidin atomlarının kararlaştırıcı enerji payı oluşturmak için gereken sayıda olmaması nedeniyle bu tablolarda, yalnız atomlar arası itmenin oluştuğu veya oluşmadığı durumlar belirlenebilmektedir. Toplam enerjide yer almakta olan terimlerin ve yakın atomların rolünü belirlemek için, bu tablolar torsiyon enerji gözönüne alınarak ve alınmayarak, ve NH_2 grubunun $NC_\alpha O$ ile yerdeğiştirdiği durumlarda da oluşturuldu. Hesaplamalar tüm durumlarda konformasyon imkanlarının aynı karektere sahip olduğunu göstermektedir. Bu, kayd ettiğimiz gibi, monopeptid içinde kararlaştırıcı temaslarının azlığının, yapı gerginliğinin ise atomların üst üste binmesi sonucu oluştuğu şeklinde izah edilebilir.

Tabloların incelenmesi sonucu enerjinin minimizasyonu için iki kat açılardan Tablo 1'de başlangıç değerleri verilmiştir. Bu değerler seçilirken yan zincirlerin farklı yönleri ve gerginliği olmayan tüm şeritlerin kapsanması hedef alınmıştır. Tüm iki kat açılardan değişmesiyle enerjisinin minimizasyonu sonucu elde edilmiş ve bağıl enerjisi [0-10 kcal/mol] aralığına düşen konformasyonların tablosu hazırlanmıştır. Görüldüğü gibi aşağı enerjili konformasyonlar bir kaide olarak *R* ve *B* tipli olmaktadır. *L* tipli konformasyonlara karşılık gelen başlangıç variantlardan yalnız bir tanesi minimizasyon sonucu bağıl enerjinin [0-10 kcal/mol] aralığına düşmektedir. Tablodan görüldüğü gibi farklı değerlerden başlayan minimizasyonlar herbir yapı tipinde belirli bir konformasyonun üstünlüğünü aşıkaretmektedir. Tabloda 31, 32, 33 numaralarla verilmekte olan *B* tipli yapıların başlangıç iki kat açı değerleri, *L* tipli yapılara uygun alınmıştır. Minimizasyon sonucu, *L* tipli başlangıç değerlere sahip variant, *B* tipine uygun gelen değerlere geçmiştir.

3.1.2 *Gly* Monopeptidi

Yan zincirin olmaması nedeniyle, *Gly* amino asidi polipeptid zincirinde en hareketli elemandır. *Gly* için kurulmuş konformasyon haritasında atomların üst üste binmesi sebebiyle mümkün olmayan değerlere karşılık şeritler, haritanın iç kısımlarına düşmektedir. Bu şeritlerin sınırladığı dört düşük enerjili bölge *R*, *B*, *L*, *P* tipli yapılara ait konformasyonların mümkün olduğunu göstermektedir. Haritadan yararlanarak, enerjinin iki kat açılara göre minimizasyonu için başlangıç variantlar oluşturuldu. Minimizasyon sonucu bağıl enerjisi [0-10 kcal/mol] aralığına düşen konformasyonlar Tablo 2'de verilmektedir.

Tablo 1. Glu-monopeptidinin düşük enerjili konformasyonları.¹

	Biçim	İki Yüzlü Açılar (Derece)					Enerji (kcal/mol)	
		φ	χ_1	χ_2	χ_3	ψ	Toplam Enerji	Bağlı Enerji
1	B_{33}	-74.02	-76.17	175.73	74.71	137.99	-1.46	1.11
2	B_{33}	-73.74	-175.53	75.64	69.73	137.57	-1.43	1.14
3	B_{33}	-73.40	-175.39	176.59	71.12	138.93	-1.44	1.13
4	B_{33}	-73.00	-176.35	176.30	71.41	138.79	-1.45	1.12
5	B_{33}	-73.56	-175.88	176.29	69.42	138.10	-1.44	1.13
6	B_{33}	-72.79	-175.93	175.92	72.78	136.20	-1.43	1.14
14	B_{33}	-178.83	-176.51	175.49	69.49	135.22	-0.89	1.68
15	B_{33}	-179.76	-176.14	174.90	72.14	135.43	-0.91	1.66
16	B_{33}	-179.26	-175.94	175.25	73.76	134.10	-0.90	1.67
17	B_{33}	-179.26	-175.55	175.05	72.49	134.46	-0.91	1.66
18	B_{23}	-137.25	60.74	-178.23	179.09	162.86	-0.24	2.33
19	B_{23}	-93.39	61.07	176.48	179.09	162.28	-0.74	1.83
20	B_{31}	-77.01	179.71	58.93	-118.07	141.30	-2.39	0.18
21	B_{31}	-178.10	-178.82	60.37	-117.78	139.96	-1.91	0.66
22	B_{31}	-78.69	-179.57	59.25	-111.19	141.83	-2.57	0.00
23	B_{23}	-91.79	60.28	-179.86	178.44	161.81	-0.74	1.83
24	B_{32}	-74.32	-174.06	82.37	141.82	128.36	0.62	3.19
25	B_{32}	-177.97	-175.79	81.19	145.73	124.12	1.06	3.63
32	B_{31}	-179.41	-177.80	59.48	-105.02	141.98	-2.20	0.37
33	B_{23}	-155.36	61.32	-178.57	174.79	166.54	-0.39	2.18
7	R_{33}	-59.75	-179.45	176.72	72.16	-66.48	-0.23	2.34
8	R_{33}	-57.64	-179.04	176.79	72.55	-63.80	-0.27	2.30
9	R_{33}	-59.96	-179.88	176.72	71.23	-66.57	-0.22	2.35
10	R_{33}	-51.91	-179.15	177.83	75.40	-62.88	-0.37	2.20
11	R_{33}	-178.46	177.88	177.07	79.15	-55.71	-1.04	1.53
13	R_{33}	-60.48	-179.98	176.62	71.95	-66.73	-0.21	2.36
26	R_{32}	-64.75	178.51	61.06	-123.04	-67.88	-0.08	2.49
28	R_{33}	-179.13	-178.71	177.26	-176.44	-56.38	-0.30	2.27
31	L_{23}	146.19	61.63	-179.26	-179.19	3.48	2.87	5.44

¹Tüm tablolarda iki katlı açılarla ilgili biçim gösterimlerindeki indislerin sayısının tamamı yerine, kolaylık olması bakımından, sadece karşılığı önleyecek sayıda indis kullanılmıştır.

Tablo 2. *Gly*-Monopeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonları.

Biçim	İki Yüzlü Açılar (Derece)		Enerji (kcal/mol)	
	φ_1	ψ_1	Top. En.	Bağlı En.
<i>B</i>	-80.33	72.66	0.85	0.01
<i>B</i>	-82.63	66.98	0.86	0.02
<i>B</i>	-180.00	180.00	1.64	0.80
<i>B</i>	-117.19	72.33	1.80	0.96
<i>B</i>	-148.08	96.91	2.18	1.34
<i>B</i>	-81.55	171.96	2.76	1.92
<i>B</i>	-79.28	72.77	0.86	0.02
<i>R</i>	-158.98	-77.09	1.97	1.13
<i>R</i>	-160.00	-120.00	2.62	1.78
<i>R</i>	-142.22	-144.74	2.36	1.52
<i>R</i>	-121.51	-163.27	2.27	1.43
<i>R</i>	-97.42	-118.76	2.65	1.81
<i>R</i>	-120.85	-144.99	2.53	1.69
<i>R</i>	-120.00	-120.00	2.76	1.92
<i>L</i>	180.00	180.00	1.64	0.80
<i>L</i>	70.52	59.35	1.71	0.87
<i>L</i>	95.29	63.93	1.78	0.94
<i>L</i>	83.10	74.83	1.75	0.91
<i>L</i>	76.02	66.80	1.69	0.85
<i>P</i>	177.18	-176.98	1.73	0.89
<i>P</i>	81.79	-68.29	0.84	0.00
<i>P</i>	140.61	-120.32	2.42	1.58
<i>P</i>	123.79	-148.23	2.28	1.44
<i>P</i>	141.88	-65.41	1.76	0.92
<i>P</i>	82.84	-67.60	0.85	0.01
<i>P</i>	78.34	-73.82	0.88	0.03
<i>P</i>	80.16	-73.09	0.85	0.01

3.1.3 Arg Monopeptidi

Yan zincirinin büyük ve yüklü olması sebebiyle *Arg* amino asit artığı çeşitli özelliklere sahiptir. Bu artık, bir kaide olarak, polipeptid molekülünün biyolojik aktifliğinde önemli bir yer tutmaktadır. Yan zincirin yönünü belirleyen yedi tane iki kat açılardan torsiyon enerjisinin minimumuna karşılık gelen değerlerinde, φ ve ψ' ye göre enerji haritaları kuruldu. Haritalardan yan zincirlerin yönelmesinin φ ve ψ' nin aşağı enerjili duruma karşılık gelen değerlerini kesin sınırladığı görülmektedir. Genellikle yan zincirdeki, atomların ana zincirdeki atomlarla üst üste binmesi durumlarına karşılık gelen yasak bölgeler, haritanın büyük bir kısmını kapsamaktadır. Aşağı enerjili bölgelerden alınmış başlangıç değerlere göre, enerjinin minimizasyonu sonucu elde edilen konformasyonlardan bağlı enerjileri [0-10 kcal/mol] aralığına düşenleri Tablo 3'de verilmektedir. Bu konformasyonların tümünde, elektrostatik enerji kararlaştırıcı rol oynamaktadır.

3.1.4 Phe - NH₂ Monopeptidi

Yan zincirinde benzol yer alan *Phe* amino asit artığının konformasyon imkanları daha da sınırlanmaktadır. Onbir tane atomdan oluşan grubun yönü, bir tane iki kat açı ile belirlenmektedir. Düzlem yapıya sahip biyolojik faaliyet ortamlarında, bir kaide olarak, polar olmayan benzol halkası φ ve ψ' ye göre aşağı enerjili alanları *R* ve *B* kısımlara sıkıştırılmaktadır. Yan zincirin $\chi_1 = 180.00^\circ$ $\chi_2 = 60.00^\circ$ değerlerinde kurulan haritada, *L* kısmında üst üste binmesiyle ilgili gerginlik 2 kcal/mol olmaktadır. Tüm bölgeleri kapsamakla başlangıç variantları seçildi ve iki kat açılardan değerlerine göre toplam enerji minimize edildi. Bağlı enerjili [0-10 kcal/mol] aralığına düşen konformasyonlar Tablo 4'de verilmiştir.

3.1.5 Glu¹ - Gly² Dipeptidi

Glu¹ - Gly² dipeptidinin, bunu oluşturan mono-peptidlerin düşük enerjili durumlarının lineer kombinasyonlarının başlangıç değerleri alınarak toplam enerjinin tüm iki kat açılara göre minimizasyonu elde edilmiş konformasyonların bağlı enerjiye göre dağılımı Tablo 5'de verilmiştir. Bu dipeptidin de her iki şekline ait konformasyonlar, düşük enerjili yapılar arasında yer almaktadır. *Gly* amino asitinin yan zincirinin olmaması bu dağılımın *Glu* mono-peptidinin konformasyonlarının enerjiye göre dağılımından çok az farka sahip olmasına sebep olmaktadır. Tablo 6'da verilen enerji parametreleri, mono-peptidlerin atomlar arasında kararlaştırıcı temasların

azlığı elektrostatik etkinin bozucu rol oynadığını göstermektedir.

Tablo 3. Arg-Monopeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonları.

Biçim	İki Yüzlü Açılar (Derece)									Enerji (kcal/mol)	
	ψ_1	χ_1	χ_2	χ_3	χ_4	χ_5	χ_6	χ_7	ψ_1	Top. En.	Bağlı En.
1B ₃₂	-152.60	-176.64	176.09	178.97	-179.80	-179.99	179.90	179.84	140.65	-5.31	0.21
13B ₃₃	-81.49	-176.60	178.06	68.17	-177.00	-178.83	179.42	179.76	119.87	-4.62	0.90
41B ₁₃	-158.82	58.71	-179.34	-179.97	179.84	179.74	179.76	179.75	160.50	-5.51	0.01
58B ₃₁	-89.49	-179.67	65.61	172.16	179.90	179.73	179.75	179.75	97.97	-4.16	1.36
64B ₂₃	-150.08	60.63	178.67	-179.88	179.87	179.87	179.78	179.70	160.15	-5.46	0.06
68B ₃₂	-139.07	-179.14	178.23	179.46	-179.96	179.72	179.72	179.59	127.96	-5.12	0.40
76B ₃₃	-149.61	-176.52	178.95	121.19	-178.95	-179.89	179.93	-179.98	141.08	-0.14	5.38
62B ₂₃	-158.84	121.26	179.63	179.79	179.89	179.79	179.80	179.78	146.28	1.99	7.51
55B ₃₁	-84.25	177.98	61.99	172.19	179.94	-179.63	179.88	179.81	105.17	-4.25	1.27
24B ₃₃	-152.19	-177.40	-179.94	68.13	-176.37	178.36	179.21	179.74	96.58	-4.53	0.99
30B ₃₃	-154.15	-176.33	176.57	179.21	-179.73	0.02	179.77	179.62	139.17	-5.29	0.23
3R ₃₃	-82.37	-178.01	177.66	179.45	179.97	179.82	179.78	179.74	-52.94	-5.13	0.39
21R ₃₃	-118.45	-179.10	178.04	68.20	-177.04	178.79	179.39	179.78	-58.97	-4.85	0.67
33R ₃₃	-157.74	-178.24	177.60	179.44	-179.45	-0.72	179.59	179.77	-59.28	-4.57	0.95
42R ₁₃	-157.39	59.13	-179.63	-179.18	179.84	179.78	179.76	179.76	162.82	-5.51	0.01
56R ₃₁	-84.01	176.85	60.96	171.60	179.41	179.84	179.83	179.79	-53.72	-4.70	0.82
63R ₂₃	-163.59	178.94	175.59	179.32	179.77	179.77	179.77	179.74	-59.86	-4.50	1.02
72R ₃₂	-90.14	-177.81	177.86	179.37	-179.93	179.87	179.79	179.73	-52.58	-5.15	0.37
79R ₃₃	-82.12	-177.91	178.83	120.21	180.00	179.77	179.76	179.74	-52.82	0.07	5.57
53R ₁₃	-89.22	71.42	-176.85	-179.59	179.76	179.82	179.77	179.76	-32.58	-2.56	2.96
45R ₁₃	-147.45	59.48	-179.99	-179.34	179.67	179.56	179.69	179.77	161.84	-5.45	0.07
8L ₃₃	-152.49	-176.64	176.36	179.24	180.00	179.73	179.75	179.73	140.67	-5.30	0.22
11L ₃₃	-153.79	-176.79	177.66	177.35	180.00	179.74	179.75	179.73	109.61	-4.84	0.68
46L ₁₃	-156.44	58.79	-179.05	180.00	179.53	-179.55	179.79	179.76	161.30	-5.52	0.00
61L ₃₁	57.54	-173.43	68.06	169.99	180.00	179.72	179.74	179.72	82.66	-1.35	4.17
74L ₃₂	-108.96	-176.93	176.93	179.22	179.97	179.60	179.69	179.72	137.92	-5.03	0.49
66L ₂₃	-156.94	59.09	-179.14	179.89	179.82	179.74	179.75	179.75	161.82	-5.52	0.00

Tablo 4. *Phe*-Monopeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonları.

Biçim	İki Yüzlü Açılar (Derece)				Enerji (kcal/mol)	
	φ_1	χ_1	χ_2	ψ_1	Top. En.	Bağlı En.
1B ₃₃	-101.24	-177.29	-104.19	110.33	-3.32	0.89
12B ₃₁	-142.95	178.64	70.70	142.06	-3.61	0.60
13B ₃₁	-90.53	-179.14	80.48	137.89	-3.49	0.72
37B ₃₂	-87.64	-179.37	89.04	129.01	-3.47	0.74
6B ₃₃	-97.38	-179.76	-107.76	100.98	-3.23	0.98
25B ₁₃	-79.63	61.00	-178.93	39.97	9.00	13.21
30B ₁₃	-139.39	57.98	-82.79	23.64	-2.10	2.11
39B ₃₂	-99.99	-178.90	89.89	132.43	-3.53	0.68
14R ₃₁	-82.27	-179.64	76.16	-55.12	-3.45	0.76
15R ₃₁	-138.19	178.39	73.99	-66.09	-3.29	0.92
20R ₃₁	-98.67	179.04	72.38	-60.22	-3.49	0.72
32R ₁₃	-155.23	60.30	-88.78	165.50	-4.21	0.00
33R ₁₃	-78.30	62.34	-178.21	-159.41	8.89	13.10
42R ₃₂	-149.96	-179.68	88.35	-63.31	-3.28	0.93
41R ₃₂	-86.40	-179.28	89.21	-55.61	-3.58	0.63
23L ₃₁	54.12	-176.35	64.85	73.28	-1.22	2.99
24L ₃₁	52.85	-173.88	61.29	62.98	-1.16	0.76

Tablo 5. *Glu* – *Gly* Dipeptidinin Konformasyonlarının Bağlı Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
	<i>BB</i>	21	38	59	28	11	5	-
e	<i>BR</i>	4	-	10	3	1	-	-
e	<i>RI</i>	-	-	13	63	7	-	-
e	<i>LB</i>	-	-	-	7	-	4	-
e	<i>LR</i>	-	-	-	-	-	-	-
e	<i>RP</i>	-	7	25	33	15	1	-
f	<i>RR</i>	-	-	-	6	6	-	-
f	<i>RB</i>	-	-	21	4	21	1	-
f	<i>BL</i>	-	23	38	59	19	7	-
f	<i>LL</i>	-	-	-	7	-	-	-
f	<i>LP</i>	-	-	-	-	-	-	-
f	<i>BP</i>	9	15	57	33	13	7	1

Tablo 6. *Glu – Gly* Dipeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
e	$B_{31}B$	-4.88	0.67	1.05	0.00
e	$B_{31}R$	-5.14	0.71	1.32	0.04
e	$R_{33}L$	-3.27	1.73	1.57	3.17
e	$L_{32}B$	-2.48	1.50	1.01	3.17
e	$R_{33}P$	-3.94	1.40	1.28	1.89
f	$R_{33}B$	-2.73	1.43	1.33	3.18
f	$R_{33}B$	-3.37	1.23	1.34	2.35
f	$B_{31}B$	-3.69	0.73	1.06	1.26
f	$L_{23}L$	-2.57	1.90	0.97	3.45
f	$B_{31}P$	-4.33	0.66	1.10	0.57

3.1.6 $Arg^3 - Phe^4NH_2$ Dipeptidi

$Arg^3 - Phe^4NH_2$ dipeptidinin enerjisinin minimizasyonu için gereken başlangıç variantlar Arg ve $PheNH_2$ monopeptidinin düşük enerjili konformasyonları temelinde teşkil edilmiştir. Tüm şekil(şeyp) ve biçimleri (formaları) içeren variantların genel sayısı 594 olmaktadır. enerjinin minimizasyonu dipeptidin yapısını belirleyen tüm iki kat açılara göre yapılmıştır. Minimizasyon sonucu bulunan konformasyonların bağlı enerjinin değerlerine göre dağılımı Tablo 7’de verilmektedir. Tablodan görüldüğü gibi şekillerin her ikisine karşılık gelen yapılar düşük enerjili konformasyonlar sırasında yer alsada, biçimlere göre farklılık doğrulanmaktadır. Tablo 8’ de dipeptidin tüm biçimlerine ait en düşük enerjili konformasyonların enerji parametreleri verilmektedir. Elektrostatik karşılıklı etki enerjisi kararlaştırıcı olsa da, aşağı yukarı tüm yapılarda aynı değere sahip olduğundan enerjinin değerlerine göre elenmeye katkıda bulunmamaktadır ve elenme valent olmayan karşılıklı etkileşme enerjisinin büyüklüğü-ne ve torsiyon enerjinin küçüklüğüne dayanmaktadır.

3.1.7 $Glu^1 - Gly^2 - Arg^3 - Phe^4 - NH_2$ Tetrapeptidi

$Glu^1 - Gly^2 - Arg^3 - Phe^4 - NH_2$ tetrapeptidini oluşturan dipeptidlerin düşük enerjili konformasyonlarının temelinde 1638 variant kuruldu. Bu variantlarda ana

zincirin ve yan zincirlerin, dipeptidlerde düşük enerjili konformasyonlara karşılık gelen tüm durumlar kapsamaktadır. Genellikle sekiz şekle sınıflandırılmış bu variantların minimizasyonu sonucu bulunan konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre dağılımı Tablo 9'da verilmektedir. Görüldüğü gibi, konformasyonlar bağıl enerjinin değerlerine göre elenebilmektedir. Bağıl enerjinin [0-3 kcal/mol] aralığında *eef*, *fef*, *eef*, *ffe*, *fff* şekillerine ait konformasyonlar yer almaktadır. Bu şekillerin her birine ait olan biçimler arasında elenme ise daha kuvvetli olmaktadır. Konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre dağılımı bükülmüş ve kısmen bükülmüş şekillerin daha ihtimalli olduğunu göstermektedir. Tam açılmış şekil *eee*'ye ait konformasyonların bağıl enerjilerinin değerleri tüm biçimler için 4kcal/mol'dan yüksek olmaktadır.

Mümkün en düşük enerjiye sahip konformasyonu $B_{322}PB_{1333333}B_{32}$ olmaktadır. *ffe* şekline ait olan bu konformasyonun üstünlüğü valent olmayan karşılıklı etkileşme enerjisinin ve elektrostatik enerjinin aynı zamanda daha kararlaştırıcı değerlere sahip olması ile sağlanmaktadır (Tablo 10). Torsiyon enerjinin azlığı, molekülün uzay yapısında gerginliğin olmamasını göstermektedir. Hidrojen bağı oluşturan atom çiftlerinin sayısı da diğer konformasyonlara nisbeten çok olmaktadır. Bu bağlardan en önemlileri Tablo 11'de verilmektedir.

Bu konformasyonun Tablo 10'da verilmiş enerji parametrelerinin değerleri mono (-6.33), di (-4.44), tri (-4.76), tetra (-1.9) etkileşmeleri için de elverişli olmaktadır. Demek ki, tüm molekülü kapsayan yapıda, önceki kademelerde enerjik elemeler sonucu elde edilen düşük enerjili yapıların birleştirilirken ilave kararlaştırıcı temaslar oluşturulması süresinde mono, di-etkileşmelere zıt olaylar yer almamaktadır. Alınan fiziki modelde *Glu - Gly - Arg - Phe - NH₂* molekülünün en düşük enerjili $B_{322}PB_{1333333}B_{32}$ konformasyonlarının geometrik parametreleri ve atomların koordinatları Tablo E1 ve E2' de verilmiştir. $Glu^1 - Gly^2 - Arg^3 - Phe^4 - NH_2$ molekülünün en düşük enerjili uzay yapısının monopeptid içi ve monopeptid arası karşılıklı etkileşme enerjilerinin değerleri $B_{322}PB_{1333333}B_{32}$ Tablo 12'de verilmiştir. Ana zincirin *ffe* şekline ait diğer biçimlerinden hiç biri bağıl enerjinin [0-3 kcal/mol] aralığında yer almamaktadır. Bunlardan en düşük enerjili $R_{331}RB_{2333333}B_{32}$ konformasyonunda hem hidrojen bağlarının, hem de elektrostatik karşılıklı etkilerin enerjileri azalmaktadır. Diğer yandan, yapının gerginliğinin göstergesi olan torsiyon enerjilerin değerleri de artmaktadır. Bu konformasyonun monopeptid dahili ve monopeptid arası karşılıklı etkileşme enerjilerinin değerleri Tablo 13' de verilmektedir. Tablo 12'yi Tablo 13 ile karşılaştırılmasından bu etkilerin de zayıfladığı görülmektedir.

ffe şekline dahil diğer birimlere ait konformasyonlarda da aynı olaylar yeralmaktadır.

Ana zincirin tam bükülmesine karşılık gelen *fff* şekline dahil olan *BPRB* biçimine ait konformasyonlarda bağıl enerji [0-1 kcal/mol] aralığında yeralmaktadır. Bunlardan en düşük enerjiye sahip olan $B_{322}PR_{323333}B_{12}$ dir ($E_{\text{bağıl}} = 0.31 \text{ kcal/mol}$). Bu konformasyonda valent olmayan etkileşmenin en büyük değeri gözlenmiştir. Elektrostatik enerjinin küçük de olsa kararlaşıma katkısı olmaktadır. Ancak, kuvvetli Van der Vals etkileşmenin doğrulanması sonucu torsiyon enerji artışından molekülün yapısında belli gerginlik yeralmaktadır. Bu konformasyonda da $OE_2(Glu^1)$ ve $NH-(Arg^3)$ atom grupları arasında enerjisi -1.38 kcal/mol olan ve uzunluğu 1.91 Å olan hidrojen bağı oluşmaktadır. Bu konformasyonun artıkları içi ve arası etkileşme enerjileri Tablo 14' da verilmiştir. Görüldüğü gibi Glu^1 ve $Phe^4 NH_2$ monopeptidleri arasında kuvvetli Van der Vals temasları ($E = -5.26 \text{ kcal/mol}$) bu konformasyonun en önemli özelliğidir. Bundan başka *fff* şekline dahil ve bağıl enerjisi 1.78 kcal/mol olan $R_{322}RR_{3333133}B_{12}$ konformasyonun dahil olduğu biçimin dışında hiç bir biçime ait konformasyonlar, bağıl enerjinin değerinin [0-3 kcal/mol] aralığında yer almamaktadır. Daha düşük enerjili durumlara nisbeten bu konformasyonda hidrojen bağların ve elektrostatik karşılıklı etkileşme enerjisinin kararlaşıma vermiş olduğu katkı azalmaktadır. Monopeptid içi karşılıklı etkileşmelerinin değerinde büyük farklar olmasa da, monopeptidler arası karşılıklı etkiler azalmıştır.

Bağıl enerjisi 0.98 kcal/mol olan $B_{322}LR_{3333133}B_{12}$ konformasyonu *fef* şekline aittir. Kısmen bükülmüş bu şeklin de farklı biçimleri, bağıl enerjinin değerlerine göre elenebilmektedir. Bu şekle dahil diğer biçimlere ait konformasyonlardan yalnız *RBRB* tipleri bağıl enerjinin [0-5 kcal/mol] aralığında yer almaktadır. *fef* şeklinin en düşük enerjili konformasyonu olan $B_{322}LR_{3333133}B_{12}$ 'nin enerjik parametreleri Tablo 15'de verilmiştir. *efe* şekline ait bağıl enerjinin [0-3 kcal/mol] arasında yeralan $R_{332}PB_{3333333}B_{33}$ konformasyonunun enerjik parametrelerinin irdelenmesi sonucu, tam doğrulanamayan hidrojen bağlarının ve büyük değerlere sahip torsiyon enerjinin yapıyı enerjik bakımdan etkilediği görülmektedir. Monopeptidler arası etkileşme de zayıf olmaktadır. Aynı şeyleri *fee* şekline ait olan konformasyonların enerjik parametrelerinden de görmek mümkündür.

Tablo 7. *Arg - Phe - NH₂* Dipeptidinin Konformasyonlarının Bağlı Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e	<i>BB</i>	-	38	121	47	1	7	31
e	<i>BR</i>	-	-	63	11	-	8	9
e	<i>RL</i>	-	-	-	-	5	9	0
e	<i>LB</i>	-	-	-	-	1	11	1
e	<i>LR</i>	-	-	-	-	-	5	1
f	<i>RR</i>	0	-	14	15	4	5	8
f	<i>RB</i>	3	3	21	23	8	12	16
f	<i>BL</i>	-	-	1	-	26	8	2
f	<i>LL</i>	-	-	-	-	-	2	-

Tablo 8. *Arg - Phe - NH₂* Dipeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekilp	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
e	<i>B₃₃B₁₂</i>	-7.62	-3.68	0.81	1.03
e	<i>B₃₃R₃₂</i>	-7.07	-3.11	0.79	2.13
e	<i>R₃₃L₃₂</i>	-5.06	-3.02	1.10	4.54
e	<i>L₃₂B₁₂</i>	-4.96	-3.47	1.45	4.54
e	<i>L₃₂R₃₂</i>	-3.45	-2.96	1.38	6.48
f	<i>R₃₃R₃₂</i>	-6.47	-3.37	0.76	2.44
f	<i>R₃₃B₂₂</i>	-8.73	-3.67	0.88	0.00
f	<i>B₂₃L₃₂</i>	-4.60	-3.59	0.99	4.33
f	<i>L₃₂L₃₂</i>	-1.74	-3.19	1.65	8.24

Tablo 9. *Glu-Gly-Arg-Phe-NH₂* Tetrapeptidinin Konformasyonlarının Bağıl Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
fff	RRRR	-	-	-	-	-	3	5
fff	RRRB	-	1	2	1	2	8	-
fff	RRBL	-	-	-	-	-	7	1
fff	BPLL	-	-	-	-	-	-	2
fff	BPBL	-	-	-	-	-	18	6
fff	BPRB	2	1	4	4	4	14	5
fff	BPRR	-	-	-	7	1	7	4
fff	BLLL	-	-	-	-	-	-	5
fff	LPRR	-	-	-	-	-	3	1
fff	LPRB	-	-	-	-	-	3	2
ffe	RRBB	-	-	-	6	8	5	-
ffe	RRBR	-	-	-	3	2	3	-
ffe	RRRL	-	-	-	-	-	8	4
ffe	BPBB	2	1	6	4	17	29	-
ffe	BPBR	-	-	-	4	7	18	-
ffe	BPRL	-	-	-	1	4	20	14
ffe	LPBB	-	-	-	-	-	2	-
ffe	LPRL	-	-	-	-	-	2	2
ffe	BLLR	-	-	-	-	-	1	3
ffe	BLLB	-	-	-	-	-	1	2
fef	RBRB	-	-	1	-	-	6	-
fef	RBRR	-	-	-	-	-	3	1
fef	RBBL	-	-	1	-	-	4	-
fef	RRLR	-	-	1	-	-	-	1
fef	RRLB	-	-	1	-	-	18	6
fef	RRLR	1	1	3	3	4	28	2
fef	BLBL	-	-	1	-	-	22	1

Tablo 9'un Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eee	<i>BBBB</i>	-	-	-	-	4	56	2
eee	<i>BBBR</i>	-	-	-	-	-	24	5
eee	<i>BBRL</i>	-	-	-	-	-	10	24
eee	<i>BRRL</i>	-	-	-	-	-	4	7
eee	<i>BRLB</i>	-	-	-	-	-	-	9
ee f	<i>BBRR</i>	-	-	-	-	-	13	11
ee f	<i>BBRB</i>	-	-	2	-	2	29	10
ee f	<i>BBBL</i>	-	-	-	-	-	7	13
ee f	<i>BRLL</i>	-	-	-	-	-	-	5
efe	<i>BBLR</i>	-	-	-	-	-	1	4
efe	<i>BBLB</i>	-	-	-	-	-	2	8
efe	<i>BRBB</i>	-	-	-	2	2	36	-
efe	<i>BRBR</i>	-	-	-	-	-	23	1
efe	<i>BRRL</i>	-	-	-	-	-	18	11
eff	<i>BBLL</i>	-	-	-	-	-	-	5
eff	<i>BRRB</i>	-	-	-	-	1	31	3
eff	<i>BRRR</i>	-	-	-	-	-	13	7
eff	<i>BRBL</i>	-	-	-	-	-	15	4

Tablo. 10. *Glu - Gly - Arg - Phe - NH₂* Tetrapeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
eee	$B_{32}BB_{32}B_{12}$	-13.27	-1.69	4.54	4.03
eee	$B_{32}BB_{23}R_{33}$	-11.78	-0.19	2.73	5.21
eee	$B_{32}BR_{33}L_{32}$	-9.69	-1.20	3.27	6.84
eee	$B_{31}RL_{32}R_{32}$	-7.54	-0.11	4.87	11.66
eee	$B_{31}RL_{32}B_{32}$	-7.20	-0.86	4.84	11.22
eee	$R_{32}LB_{13}B_{12}$	-13.87	-0.05	5.15	5.68
eee	$R_{32}LB_{13}R_{32}$	-13.80	0.55	5.32	6.53
eee	$R_{33}PL_{32}R_{32}$	-7.49	0.88	4.84	12.68
eee	$L_{32}BB_{33}B_{12}$	-11.53	-1.62	3.23	4.53
eee	$L_{32}BB_{13}R_{32}$	-13.39	1.03	3.26	5.36
ee f	$B_{32}BR_{32}R_{32}$	-10.88	-1.90	3.67	5.35
ee f	$B_{32}BR_{33}B_{22}$	-12.66	-1.93	2.64	2.50
ee f	$B_{31}BB_{33}L_{32}$	-8.50	-1.43	3.41	7.93
ee f	$B_{31}RL_{32}L_{32}$	-6.25	-0.32	5.26	13.13
ee f	$R_{32}LR_{33}R_{32}$	-11.10	-0.21	4.87	8.00
ee f	$R_{33}LR_{33}B_{22}$	-14.08	-0.03	5.01	3.35
ee f	$R_{31}LB_{13}L_{32}$	-11.42	0.29	5.29	8.60
ee f	$R_{23}PL_{32}B_{32}$	-5.04	-2.05	2.41	9.77
ee f	$L_{32}BR_{32}R_{32}$	-10.40	-1.66	3.49	5.88
ee f	$L_{32}BR_{33}B_{22}$	-12.69	-1.86	2.50	2.40
ee f	$L_{32}BB_{23}L_{32}$	-10.78	0.51	3.36	7.54
e f e	$B_{32}BL_{32}R_{32}$	-6.87	-1.38	3.08	9.28
e f e	$B_{32}BL_{32}B_{32}$	-7.11	-1.91	3.17	8.60
e f e	$B_{32}RB_{33}B_{12}$	-14.22	-1.48	4.31	3.06
e f e	$B_{32}RB_{33}R_{32}$	-11.56	-0.80	4.18	6.27
e f e	$B_{32}RR_{33}L_{32}$	-10.65	-0.79	4.90	7.91
e f e	$R_{32}LL_{33}B_{12}$	-12.04	-0.88	4.83	6.37
e f e	$R_{31}LL_{32}R_{32}$	-4.65	0.17	2.92	12.90
e f e	$R_{33}PB_{33}B_{33}$	-15.64	-1.13	5.31	2.98

Tablo 10'un Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
e f e	$R_{33}PB_{23}R_{32}$	-13.12	-0.55	5.21	5.99
e f e	$R_{13}PR_{23}L_{32}$	-12.08	-0.77	3.05	4.64
e f f	$B_{32}BL_{32}L_{32}$	-6.98	-1.03	4.17	10.61
e f f	$B_{32}RR_{32}B_{32}$	-11.20	-1.38	3.06	4.94
e f f	$B_{32}RR_{32}R_{32}$	-9.32	-0.73	2.31	6.71
e f f	$B_{32}RB_{23}L_{32}$	-12.03	-1.84	6.15	6.72
e f f	$R_{31}LL_{32}L_{32}$	-3.02	0.51	3.30	15.24
e f f	$R_{33}PR_{32}R_{32}$	-11.74	-0.01	3.26	5.96
e f f	$R_{33}PR_{33}B_{22}$	-12.93	-0.94	3.29	3.86
e f f	$R_{33}PB_{31}L_{32}$	-13.51	-1.00	7.22	7.16
f f f	$B_{33}LL_{32}L_{32}$	-4.60	-0.58	3.14	12.41
f f f	$B_{32}PR_{32}R_{32}$	-13.48	-1.35	3.78	3.40
f f f	$B_{32}PR_{32}B_{12}$	-16.30	-1.73	3.89	0.31
f f f	$B_{32}PB_{13}L_{32}$	-9.70	-1.86	2.13	5.02
f f f	$R_{33}RR_{32}R_{32}$	-9.16	-0.61	3.65	8.33
f f f	$R_{32}RR_{33}B_{12}$	-15.24	-1.46	4.03	1.78
f f f	$R_{33}RB_{23}L_{32}$	-9.89	-1.39	2.69	5.87
f f f	$L_{23}PR_{33}B_{32}$	-9.53	-0.59	1.91	6.24
f f f	$L_{33}PR_{32}R_{32}$	-8.08	0.46	1.91	8.74
f f e	$B_{32}LL_{32}B_{32}$	-8.75	-1.27	3.10	7.53
f f e	$B_{32}LL_{32}R_{32}$	-9.19	-0.40	2.95	7.81
f f e	$B_{32}PB_{33}B_{12}$	-15.21	-2.22	2.98	0.00
f f e	$B_{33}PB_{33}R_{32}$	-11.64	-1.04	2.06	3.83
f f e	$B_{32}PR_{31}L_{32}$	-12.92	-1.70	3.87	3.69
f f e	$R_{33}RB_{23}B_{32}$	-13.75	-1.53	4.06	3.23
f f e	$R_{31}RB_{33}R_{32}$	-15.20	-0.46	4.50	3.29
f f e	$R_{31}RR_{33}L_{32}$	-9.24	-0.61	3.49	8.10
f f e	$R_{32}BL_{32}B_{32}$	-6.41	-0.37	2.84	10.51
f f e	$R_{32}BL_{32}R_{32}$	-6.65	0.47	2.76	11.03

Tablo 10'un Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
f f e	$L_{23}PB_{33}B_{12}$	-9.27	-0.81	2.04	6.41
f f e	$L_{23}PR_{32}L_{32}$	-10.66	0.43	5.11	9.33
f e f	$B_{33}LR_{32}R_{32}$	-10.79	-1.66	3.19	5.19
f e f	$B_{32}LR_{33}B_{12}$	-14.12	-1.66	2.31	0.98
f e f	$B_{33}LB_{13}L_{32}$	-11.18	-1.98	4.31	5.60
f e f	$R_{32}BR_{33}B_{22}$	-13.15	-1.05	2.29	2.55
f e f	$R_{33}BR_{32}R_{32}$	-8.18	-1.22	2.57	7.62
f e f	$R_{33}BB_{32}L_{32}$	-10.11	-1.58	4.35	7.11
f e e	$B_{33}LB_{33}B_{12}$	-11.23	-2.22	2.10	3.10
f e e	$B_{33}LB_{33}R_{32}$	-11.00	-1.55	2.02	3.92
f e e	$B_{33}LR_{33}L_{32}$	-8.86	-1.43	2.51	6.67
f e e	$B_{32}PL_{32}B_{32}$	-6.94	-1.94	2.84	8.41
f e e	$B_{33}LB_{33}R_{32}$	-7.17	-1.28	2.76	8.76
f e e	$R_{32}RL_{32}B_{32}$	-9.07	-1.41	5.15	9.12
f e e	$R_{31}RL_{32}R_{32}$	-9.37	-0.82	5.44	9.71
f e e	$R_{33}BB_{23}R_{32}$	-12.23	-1.83	3.65	4.04
f e e	$R_{33}BR_{33}L_{32}$	-6.99	-0.98	2.68	9.16
f e e	$R_{33}BL_{32}B_{32}$	-7.62	-1.52	2.87	8.18
f e e	$L_{23}PL_{32}B_{12}$	-6.12	0.84	4.33	13.50

Tablo 11. Hidrojen Bağı Oluşturan Atom Çiftlerinin Sayısı

($B_{322}PB_{1333333}B_{32}$).

Bağ oluşturan atom grupları	Bağ uzunluğu H°	Enerji kcal/mol
$NH(Glu^1)$, $OE^2(Glu^1)$	2.31	-0.58
$OE^2(Glu^1)$, $NH(Arg^3)$	1.99	-1.22
$NH(Phe^4)$, $CO(Phe^4)$	2.23	-0.70
$CO(Phe^4)$, NH_2	2.52	-0.33

Tablo 12. $Glu^1Gly^2Arg^3Phe^4NH_2$ molekülünün en düşük enerjili uzay yapısının monopeptid içi ve monopeptid arası karşılıklı etkileşme enerjilerinin değerleri $B_{322}PB_{13333333}B_{32}$ (kcal/mol).

	Glu^1	Gly^2	Arg^3	Phe^4NH_2
Glu^1	-0.69	-0.84	-2.84	-1.9
Gly^2		1.18	-0.62	-1.92
Arg^3			-4.17	-2.98
Phe^4NH_2				-2.65

Tablo 13. $Glu^1Gly^2Arg^3Phe^4NH_2$ molekülünün en düşük enerjili uzay yapısının monopeptid içi ve monopeptid arası karşılıklı etkileşme enerjilerinin değerleri $R_{331}RB_{23333333}B_{32}$ (kcal/mol).

	Glu^1	Gly^2	Arg^3	Phe^4NH_2
Glu^1	0.03	-1.55	-1.7	-2.7
Gly^2		1.32	-1.2	-0.19
Arg^3			-4.22	-2.59
Phe^4NH_2				-2.47

Tablo 14. $Glu^1Gly^2Arg^3Phe^4NH_2$ molekülünün en düşük enerjili uzay yapısının monopeptid içi ve monopeptid arası karşılıklı etkileşme enerjilerinin değerleri $B_{322}PR_{32333333}B_{12}$ (kcal/mol).

	Glu^1	Gly^2	Arg^3	Phe^4NH_2
Glu^1	-0.73	-1.49	-2.24	-5.26
Gly^2		1.22	-1.17	-1.62
Arg^3			-3.35	-3.18
Phe^4NH_2				-0.22

Tablo 15 $Glu^1Gly^2Arg^3Phe^4NH_2$ molekülünün en düşük enerjili uzay yapısının monopeptid içi ve monopeptid arası karşılıklı etkileşme enerjilerinin değerleri $B_{322}LR_{333133}B_{12}$ (kcal/mol).

	Glu^1	Gly^2	Arg^3	Phe^4NH_2
Glu^1	-0.74	0.64	-1.85	-3.22
Gly^2		1.28	-0.95	-0.52
Arg^3			-3.84	-3.70
Phe^4NH_2				-2.88

3.2. $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3 - Gly^4 - Gly^5 - Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ Molekülünün Teorik Konformasyon Analizi

Molekülünün konformasyon analizi bunu oluşturan monopeptidlerin düşük enerjili durumlarının temelinde yapılmıştır. Bu monopeptidlerden *Leu*'nin konformasyon imkanları incelendi ve sonuçlar $Glu^1 - Leu^2$ dipeptidinin incelenmesinde kullanıldı. Adı geçen dipeptidin ve *Leu* monopeptidinin hesaplanması sonucundan yararlanarak $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3$ tripeptidi incelendi. *Gly* monopeptidinin ve $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3$ tripeptidinin düşük enerjili durumlarından yararlanarak $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3 - Gly^4$ tetrapeptidinin konformasyon imkanları irdelendi. Sonuç olarak, $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3 - Gly^4 - Gly^5 - Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ molekülünün uzay yapısı, adı geçen tetrapeptidin ve $Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ dipeptidinin Gly^5 monopeptidinin yardımıyla bağlanması durumunda mümkün olan tüm variantların enerjilerinin minimizasyonu sonucu bulundu.

3.2.1 *Leu* Monopeptidi

Yan zincirinde dallanma olması dolayısıyla konformasyon imkanları daralan *Leu* amino asit artığının φ ve ψ açılara göre konformasyon haritasında, düşük enerjili duruma karşılık gelen, küçük alanlar gözlenmektedir. Konformasyon haritasında *L* kısmına karşılık gelen tüm konformasyonların bağlı enerjisi 2 kcal/mol'dan büyüktür. Çeşitli bölgelerden alınmış ve yan zincirin farklı durumlarına karşılık gelen variantlarıniki kat açılarının değerine göre toplam enerjinin minimizasyonu sonucu elde edilmiş konformasyonların enerjik ve geometrik parametreleri Tablo 16'da verilmiştir.

3.2.2 $Glu^1 - Leu^2$ Dipeptidi

Bu dipeptidi oluşturan monopeptidler farklı fiziki-kimyasal özellikleri olan yan zincirlere sahiptirler. Elektrik yüküne sahip olan Glu^1 yan zinciri, kutupsal ortamda yüke sahip atom veya atom grupları ile etkileşmeye meyilli olsa da nötr ve kutuplanmamış Leu^2 'nin yan zinciri, bir kaide olarak, molekül dahili Van der Vals temasları oluşturur. Bundan dolayı dipeptidin konformasyonları bağıl enerjinin değerlerine göre elenebilmektedir. Tablo 17'da Glu ve Leu monopeptidlerinin düşük enerjileri temelinde oluşturulmuş yapı variantlarının minimizasyonu sonucu bulunmuş konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre dağılım da bunu tasdik etmektedir. Düşük enerjili monopeptid durumlarının kombinasyonlarından oluşan dipeptid yapıları düşük enerjiye sahiptir. Leu 'nin L durumunun yüksek enerjili olmasından dolayı, bunun içerdiği yapılar nisbeten yüksektir. Bu monopeptidler arası etkileşmenin zayıf olmasını göstermektedir. Her bir biçime ait en düşük enerjili durumların enerji parametreleri Tablo 18'de verilmiştir.

3.2.3 $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3$ Tripeptidi

Bu tripeptidin incelenmesi $Glu^1 - Leu^2$ dipeptidinin düşük enerjili durumlarının temelinde yapılmıştır. Tripeptidin toplam enerjinin minimizasyonu sonucu bulunmuş olan konformasyonların bağıl değerlerine göre dağılımı Tablo 19'de verilmektedir. Görüldüğü gibi konformasyonların enerji elenmesi çok kuvvetli olmamaktadır. Buna sebep tripeptidde kararlaştırıcı temasların sayısının az olmasıdır. Tablo 20'de verilmiş enerji parametrelerin kıyaslanması, tüm konformasyonlarda esas kararlaştırıcı eleman olan gayri valent etkileşme enerjisinin şekillere ve biçimlere bağlı olarak kesin değişmemesi görülmektedir. Öteki yandan elektrostatik itme de aşağı yukarı tüm konformasyonlar için aynı değere sahip olmaktadır. Torsiyon enerjinin değerlerinin büyük olması, atom grupları arasında Van der Vals temaslarının oluşmasının yapıyı gerginleştirme ile sonuçlandığını göstermektedir.

3.2.4 $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3 - Gly^4$ tetrapeptidi

$Glu^1 - Leu^2 - Leu^3$ tripeptidinde konformasyonlarının bağıl enerjinin değerlerine göre elenmemesi sonraki kademede çok sayıda variantların irdelenmesini gerektirdi. Adı geçen tripeptidin tüm şekil ve biçimlerinin gözönüne alınması durumunda Gly monopeptidinin düşük enerjili konformasyonları ile kombinasyonlarının sayısı 2576 olmaktadır. Toplam enerjinin tüm iki kat açılım değerine göre minimizasyonu so-

nucu elde edilen konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre dağılımı Tablo 21'de verilmektedir. Görüldüğü gibi bağıl enerjinin [0-3 kcal/mol] aralığında tüm şekillere ait konformasyonlar yer almaktadır. Bu konformasyonlardan en küçük enerjiye sahip olanlarının enerjik parametrelerinin değerleri Tablo 22'de verilmektedir. Kesin farklanmayan gayri-valent etkileşme ve elektrostatik itme enerjisi, yapıların gerginliğini belirten büyük değerli torsiyon enerjileri, konformasyonların kararlı olmadığını göstermektedir. Bu tetrapeptidin değişken, esnek yapıya sahip olması demektir.

$Glu^1 - Leu^2 - Leu^3 - Gly^4 - Gly^5 - Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ molekülünün konformasyon analizinde $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3 - Gly^4$ tetrapeptidinin yapılarının bağıl enerjinin değerlerine göre elenmemesi nedeniyle çok sayıda variantların irdelenmesi gerektiği ortaya çıktı. *Gly* monopeptidinin yan zincirinin olmaması konformasyon imkanları incelenmiş kısımları birleştiren Gly^5 ' in φ ve ψ açılara göre konformasyon haritası kurulmasını daha maksada uygun gerektirmektedir. Ancak bu açılarının değişmesi ile çok büyük atom grupları yer değiştirmektedir. Küçük açı değişimlerinde dönen kısmın boyu çok büyük olduğundan atomlar arası uzaklığın değişmesi büyük değerler almakta, hesaplamaların hassasiyeti düşük olmakta idi. Bu nedenle tüm molekülün hesabı $Glu^1 - Leu^2 - Leu^3 - Gly^4$ ve $Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ fragmentlerinin ve Gly^5 monopeptidinin düşük enerjili durumlarının kombinasyonları temelinde yapılmıştır. Tüm mümkün olan şekilleri ve biçimleri kapsayan 1920 variant irdelendi. Toplam enerjinin tüm ikikat açılarının değerlerine göre minimizasyonu sonucu bulunan konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre dağılımı Tablo 23'de verilmektedir. Görüldüğü gibi konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre kuvvetli elenmesi gerçekleşmektedir. Öyle ki, bağıl enerjinin [0-4 kcal/mol] aralığında yalnız *eeefef* şekline ait $B_{332}B_{3233}R_{3233}PBR_{3333133}B_{22}$ konformasyonu yer almaktadır. Her bir şekle ve biçime ait en düşük enerjili konformasyonların Tablo 24'da verilmiş enerjik parametrelerinin kıyaslanması bu konformasyonun üstünlüğünün gayri-valent karşılıklı etki enerjinin büyük değerleri ile temin olduğunu göstermektedir. Elektrostatik karşılıklı etki enerjisi yok sanılacak kadar küçüktür. Torsiyon enerjisinin değerinin küçüklüğü Van der Vals temaslar oluşurken yapının, gerginleşmediğini göstermektedir.

Bu konformasyonun monopeptidler dahili ve monopeptidler arası karşılıklı etkileşmesinin enerjik parametreleri Tablo 25'de verilmektedir. Monopeptidler arası etkileşmelerde valent olmayan karektere sahip temaslar daha çok yer almaktadır. Farklı işaretli yüklenmiş yan zincire sahip Arg^6 ve Glu^1 ' in etkileşmemektedir. Kutupsal

olmayan yan zincirlerin etkileşmesinin kararlaşmaya daha büyük katkısı olmaktadır.

Bu konformasyonlarda önemli hidrojen bağların enerjik parametreleri Tablo 26'de verilmektedir. *feffef* şekline ait $B_{332}L_{3133}B_{3233}LBR_{333331}B_{22}$ ($E_{bağlı} = 3.93$ kcal/mol) konformasyonu [0-5 kcal/mol] bağlı enerji aralığında yer alan diğer konformasyondur. Bu konformasyonun enerjik parametreleri $E_{bağlı}=0.00$ olan konformasyonun parametrelerine benzemektedir. Bu konformasyonda monopeptid içi ve monopeptidler arası etkileşme enerjilerinin değerleri Tablo 27'de verilmektedir.

Tablo 16. *Leu* Monopeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonları.

Biçim	İki Yüzlü Açılar (Derece)						Enerji (kcal/mol)	
	φ_1	χ_1	χ_2	χ_3	χ_4	ψ_1	Top. En.	Bağlı. En.
34B ₃₃	-99.98	-172.17	154.50	-176.68	179.68	123.59	2.23	1.96
14B ₃₁	-101.31	176.81	58.32	177.11	175.11	121.28	1.14	0.87
18B ₃₂	-102.36	177.35	63.49	179.22	175.89	140.76	0.49	0.12
74B ₁₃	-149.29	55.00	124.06	179.15	-178.85	108.65	4.35	4.08
69B ₂₃	-160.53	72.87	168.80	-170.34	-179.31	154.72	2.23	1.96
72B ₁₂	-152.12	53.14	75.85	179.65	172.77	177.34	1.68	1.41
79B ₁₂	-152.57	50.15	71.93	179.40	170.88	179.27	1.58	1.31
73B ₂₂	-145.54	62.58	86.92	180.00	-179.63	154.87	2.31	2.04
38R ₃₃	-92.76	-171.23	155.62	-175.41	179.63	-62.03	1.97	1.70
22R ₃₂	-99.85	175.57	61.24	179.11	175.27	-64.04	0.27	0.00
68R ₂₃	-161.24	73.55	169.79	-170.38	-179.27	-179.88	2.28	2.01
52R ₁₂	-137.99	48.67	64.65	178.92	169.41	-176.87	1.66	1.39
71R ₂₂	-97.67	71.84	92.11	180.00	-178.54	-39.41	2.96	2.69
52L ₃₂	57.74	-175.17	69.43	179.64	176.51	70.04	2.61	2.34

Tablo 17. *Glu – Leu* Dipeptidinin Konformasyonlarının Bağlı Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e	<i>BB</i>	20	34	27	19	11	9	-
e	<i>BR</i>	9	18	14	24	8	6	-
e	<i>RL</i>	1	4	-	1	-	-	-
f	<i>RR</i>	3	5	12	15	4	1	-
f	<i>RB</i>	1	12	23	16	3	7	-
f	<i>BL</i>	-	10	1	2	-	-	-
f	<i>LL</i>	-	1	-	-	-	-	-

Tablo 18. *Glu – Leu* Dipeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
e	<i>B₃₂B₃₂</i>	-6.36	-0.34	4.82	0.10
e	<i>B₃₂R₃₂</i>	-5.60	-0.38	4.00	0.00
e	<i>R₃₃L₃₂</i>	-6.83	-0.18	5.99	0.95
f	<i>R₃₃R₃₂</i>	-7.43	0.14	6.05	0.74
f	<i>R₃₃B₃₁</i>	-7.12	0.20	5.90	0.96
f	<i>B₃₃L₃₂</i>	-6.34	-0.22	5.71	1.13
f	<i>L₃₃L₃₁</i>	-6.15	-0.07	5.69	1.44

Tablo 19. *Glu – Leu – Leu* tripeptidinin Konformasyonlarının Bağıl Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
ee	<i>BBB</i>	-	8	9	11	16	27	-
ee	<i>BBR</i>	1	2	4	6	12	16	-
ee	<i>BRL</i>	1	2	3	1	2	-	-
ee	<i>RLB</i>	-	-	5	10	11	12	-
ee	<i>RLR</i>	-	-	3	3	9	6	1
ef	<i>BBL</i>	-	-	1	5	3	-	-
ef	<i>BRB</i>	6	6	18	17	19	10	-
ef	<i>BRR</i>	1	5	7	11	15	11	-
ef	<i>RLL</i>	-	-	1	2	1	1	-
ff	<i>BLL</i>	-	1	-	-	-	1	-
ff	<i>RBL</i>	-	-	-	1	1	3	-
ff	<i>RRB</i>	-	2	6	7	8	15	-
ff	<i>RRR</i>	-	1	4	5	8	6	-
ff	<i>LLL</i>	-	-	-	-	1	-	-
fe	<i>BLB</i>	-	3	4	4	2	3	-
fe	<i>BLR</i>	-	3	4	2	1	-	-
fe	<i>RBB</i>	-	3	5	13	12	20	-
fe	<i>RBR</i>	-	-	2	5	9	14	-
fe	<i>RRL</i>	-	1	1	1	2	-	-
fe	<i>LLB</i>	-	-	2	2	-	3	-
fe	<i>LLR</i>	-	-	2	1	2	-	-

Tablo 20. *Glu – Leu – Leu* Tripeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
e e	$B_{32}B_{32}B_{32}$	-11.63	0.13	7.27	1.05
e e	$B_{32}B_{32}R_{32}$	-11.43	0.11	6.93	0.90
e e	$B_{32}R_{32}L_{32}$	-12.17	0.05	7.47	0.64
e e	$R_{32}L_{32}B_{12}$	-11.43	0.20	8.11	2.18
e e	$R_{23}L_{31}R_{12}$	-10.64	0.50	7.31	2.46
e f	$B_{32}B_{32}L_{32}$	-8.00	0.07	4.97	2.33
e f	$B_{32}R_{32}B_{12}$	-12.77	0.34	7.15	0.00
e f	$B_{32}R_{32}R_{23}$	-11.36	0.24	6.46	0.63
e f	$R_{32}L_{32}L_{32}$	-12.19	0.33	9.35	2.78
f f	$B_{32}L_{31}L_{32}$	-10.77	0.34	6.84	1.70
f f	$R_{31}B_{31}L_{32}$	-7.22	0.48	5.27	3.82
f f	$R_{31}R_{32}B_{32}$	-11.27	0.52	6.80	1.34
f f	$R_{31}R_{32}R_{32}$	-8.78	0.45	4.62	1.58
f f	$L_{33}L_{31}L_{32}$	-5.29	0.30	3.71	4.01
f e	$B_{33}L_{31}B_{12}$	-11.61	0.39	7.07	1.14
f e	$B_{33}L_{31}R_{12}$	-11.13	0.38	6.90	1.44
f e	$R_{32}B_{31}B_{12}$	-13.34	0.63	8.95	1.53
f e	$R_{31}B_{31}R_{32}$	-8.68	0.51	5.15	2.26
f e	$R_{31}R_{32}L_{32}$	-14.03	0.73	9.05	1.05
f e	$L_{33}L_{31}B_{12}$	-10.40	0.41	7.15	2.45
f e	$L_{33}L_{31}R_{32}$	-8.50	0.41	4.95	2.14

Tablo 21. *Glu – Leu – Leu – Gly* tetrapeptidinin Konformasyonlarının Bağlı Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eee	<i>BBBB</i>	-	-	-	2	18	69	-
eee	<i>BBBR</i>	-	-	-	-	2	19	-
eee	<i>BBRL</i>	-	1	2	24	16	33	-
eee	<i>BBRP</i>	3	5	18	8	15	26	-
eee	<i>BRLB</i>	1	-	14	14	19	39	-
eee	<i>RLBB</i>	-	1	2	1	2	13	-
eee	<i>RLBR</i>	-	-	1			1	-
eee	<i>RLRL</i>	-	-	1	4	2	-	-
eee	<i>RLRP</i>	-	-	-	2	7	5	-
eeef	<i>BBBL</i>	-	6	13	7	28	23	-
eeef	<i>BBBP</i>	-	-	3	10	18	43	-
eeef	<i>RLRP</i>	-	2	2	9	24	47	-
eeef	<i>BBRR</i>	-	1	1	2	3	4	-
eeef	<i>BRLP</i>	-	4	16	4	14	25	-
eeef	<i>BRLl</i>	-	7	20	14	8	23	-
eeef	<i>RLBP</i>	-	-	-	5	7	4	-
eeef	<i>RLRB</i>	-	-	1	4	5	13	-
eeef	<i>RLBL</i>	-	1	-	11	2	-	-
eeef	<i>RLRR</i>	-	-	-	-	1	2	-
efe	<i>BRBB</i>	-	-	6	13	22	60	-
efe	<i>BRBR</i>	-	-	1	1	3	7	-
efe	<i>BRRP</i>	-	9	17	25	33	38	-
efe	<i>BRRL</i>	-	1	9	27	32	22	-
efe	<i>BBLB</i>	-	-	-	5	6	20	-
efe	<i>BBLR</i>	-	-	-	-	2	1	-
eff	<i>BRBL</i>	-	-	14	42	29	2	-
eff	<i>BRBP</i>	-	-	6	19	40	53	-
eff	<i>BRRB</i>	-	-	6	23	20	78	-
eff	<i>BBLl</i>	-	-	-	7	1	21	-

Tablo 21'in Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eff	<i>BBLP</i>	-	-	-	-	6	22	-
eff	<i>BRRR</i>	-	-	1	4	4	7	-
eff	<i>RLLP</i>	-	-	-	1	-	-	-
fef	<i>RBBL</i>	-	7	7	20	15	22	-
fef	<i>RBBP</i>	-	-	5	14	19	25	-
fef	<i>RRRB</i>	-	-	2	4	11	7	-
fef	<i>BLBL</i>	-	6	4	2	7	-	-
fef	<i>BLBP</i>	-	2	4	7	3	5	-
fef	<i>BLRB</i>	-	1	3	8	9	9	-
fef	<i>BLRR</i>	-	-	1	1	4	1	-
fef	<i>RBRR</i>	-	-	-	1	1	-	-
fef	<i>RRLP</i>	-	-	-	5	8	6	-
fef	<i>RRLR</i>	-	-	-	10	7	15	-
fef	<i>LLBL</i>	-	-	-	12	2	-	-
fef	<i>LLBP</i>	-	-	-	2	2	5	-
fef	<i>LLRB</i>	-	-	3	1	2	8	-
fef	<i>LLRR</i>	-	-	1	1	-	-	-
fee	<i>RBBB</i>	-	-	2	6	18	42	3
fee	<i>RBBR</i>	-	-	1	1	1	1	2
fee	<i>RBRL</i>	1	5	2	7	5	1	-
fee	<i>RBBB</i>	-	-	-	4	-	3	-
fee	<i>BLBB</i>	1	-	-	5	6	13	-
fee	<i>BLBR</i>	-	-	-	1	1	1	-
fee	<i>BLRL</i>	-	-	21	28	12	-	1
fee	<i>BLRP</i>	-	-	9	7	11	5	-
fee	<i>RBRP</i>	2	1	6	2	1	2	-
fee	<i>RRLB</i>	-	2	1	6	3	10	-
fee	<i>LLBB</i>	-	-	-	-	1	15	1
fee	<i>LLBR</i>	-	-	-	-	1	1	-

Tablo 21'in Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	>10
f e e	<i>LLRL</i>	-	12	-	1	1	1	-
f e e	<i>LLRP</i>	2	1	3	-	3	2	-
f e e	<i>RRLR</i>	-	-	-	1	-	1	-
fff	<i>LLLL</i>	-	-	-	-	-	7	-
fff	<i>LLLP</i>	-	-	-	-	-	6	-
fff	<i>BLLL</i>	-	-	-	1	6	-	-
fff	<i>BLLP</i>	-	-	-	2	4	1	-
fff	<i>RRRB</i>	-	3	2	12	9	7	-
fff	<i>RRRR</i>	-	-	1	2	1	-	-
fff	<i>RRBL</i>	-	-	-	7	6	-	-
fff	<i>RRBP</i>	-	-	-	2	7	5	-
ffe	<i>LLLB</i>	-	-	-	-	1	3	-
ffe	<i>LLLR</i>	-	-	-	-	-	1	-
ffe	<i>BLLR</i>	-	-	1	-	-	-	-
ffe	<i>BLLB</i>	-	1	3	3	-	-	-
ffe	<i>RRRP</i>	-	7	3	12	2	5	-
ffe	<i>RRRL</i>	4	2	3	15	2	-	-
ffe	<i>RRBB</i>	-	-	-	-	4	9	-
ffe	<i>RRBR</i>	-	-	-	3	-	-	-

Tablo 22. *Glu – Leu – Leu – Gly* Tetrapeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
e e e	$B_{32}B_{32}B_{12}B$	-9.97	1.12	5.06	3.89
e e e	$B_{32}B_{32}B_{12}R$	-9.98	1.11	5.49	4.32
e e e	$B_{33}B_{32}R_{32}L$	-15.24	0.98	8.10	1.53
e e e	$B_{32}B_{32}R_{32}P$	-14.51	0.79	6.73	0.70
e e e	$B_{33}R_{32}L_{32}B$	-14.22	0.27	7.09	0.83
e e e	$B_{33}R_{33}L_{31}R$	-10.62	0.20	6.24	2.88
e e e	$R_{13}L_{31}B_{32}B$	-12.29	1.02	5.48	1.90
e e e	$R_{23}L_{31}R_{32}P$	-12.56	1.64	7.21	3.98
e e e	$R_{23}L_{31}R_{12}L$	-15.04	1.67	8.59	2.91
e e f	$B_{32}B_{32}B_{32}L$	-15.11	1.19	7.99	1.76
e e f	$B_{32}B_{32}B_{12}P$	-13.32	1.18	6.92	2.46
e e f	$B_{32}B_{32}R_{32}B$	-13.83	1.23	6.67	1.76
e e f	$B_{32}B_{32}R_{32}R$	-14.89	1.23	7.96	1.99
e e f	$B_{32}R_{32}L_{23}P$	-13.65	1.24	6.43	1.71
e e f	$B_{32}R_{32}L_{23}L$	-14.89	1.23	7.39	1.42
e e f	$R_{23}L_{31}B_{32}P$	-11.69	1.84	5.62	3.46
e e f	$R_{13}L_{31}R_{32}B$	-11.72	1.01	5.37	2.35
e e f	$R_{23}L_{31}B_{32}L$	-16.69	1.73	9.18	1.91
e e f	$R_{13}L_{32}R_{32}R$	-7.07	1.23	2.68	4.53
e f e	$B_{32}R_{32}B_{32}B$	-15.19	1.36	8.32	2.18
e f e	$B_{32}R_{12}B_{32}R$	-13.41	1.29	6.45	2.03
e f e	$B_{33}R_{32}R_{32}P$	-13.31	1.33	5.43	1.14
e f e	$B_{33}R_{32}R_{32}L$	-13.15	1.31	6.14	1.99
e f e	$B_{33}B_{32}L_{32}B$	-11.89	1.25	6.14	3.19
e f e	$B_{32}B_{32}L_{32}R$	-11.40	1.31	6.47	4.08

Tablo 22'nin Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağıl E.
e f f	$B_{31}R_{33}B_{12}L$	-14.44	1.29	8.29	2.83
e f f	$B_{32}R_{32}B_{32}P$	-13.89	1.43	6.82	2.05
e f f	$B_{32}R_{32}R_{12}B$	-13.09	1.30	6.31	2.21
e f f	$B_{23}B_{32}L_{32}L$	-13.71	1.46	8.12	3.56
e f f	$B_{23}B_{32}L_{32}P$	-13.57	1.53	8.73	4.38
e f f	$B_{33}R_{32}R_{32}R$	-15.45	1.49	8.79	2.52
e f f	$R_{32}L_{23}L_{12}P$	-12.92	1.31	7.77	3.86
f e f	$R_{31}B_{31}B_{32}L$	-18.03	1.79	9.59	1.04
f e f	$R_{32}B_{31}B_{32}P$	-14.14	1.93	6.81	2.28
f e f	$R_{31}B_{31}R_{32}B$	-10.89	1.65	4.46	2.91
f e f	$B_{33}L_{31}B_{32}L$	-16.55	1.47	8.58	1.19
f e f	$B_{33}L_{31}B_{32}P$	-14.91	1.61	6.67	1.06
f e f	$B_{33}L_{31}R_{32}B$	-13.80	1.60	6.43	1.93
f e f	$B_{33}L_{31}R_{32}R$	-10.80	1.36	4.47	2.73
f e f	$R_{31}B_{31}R_{32}R$	-11.66	1.66	5.85	3.53
f e f	$R_{31}R_{32}L_{32}P$	-12.82	1.64	7.07	3.57
f e f	$R_{31}R_{32}L_{32}L$	-12.71	1.58	7.12	3.68
f e f	$L_{33}L_{31}B_{32}L$	-10.09	1.35	4.53	3.49
f e f	$L_{33}L_{31}B_{32}P$	-9.99	1.50	4.27	3.47
f e f	$L_{33}L_{31}R_{32}B$	-11.40	1.68	4.85	2.82
f e f	$L_{33}L_{31}R_{12}R$	-13.82	1.70	6.63	2.20
f e e	$R_{31}B_{31}B_{32}B$	-14.21	2.04	7.45	2.97
f e e	$R_{31}B_{31}B_{32}R$	-14.48	1.82	7.72	2.76
f e e	$R_{31}B_{31}R_{32}L$	-14.21	1.63	6.45	0.95
f e e	$R_{32}B_{31}R_{12}P$	-15.17	1.78	8.93	3.22

Tablo 22'nin Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağıl E.
f e e	$B_{13}L_{31}B_{32}B$	-12.29	1.02	5.48	1.90
f e e	$B_{33}L_{31}B_{32}R$	-12.01	1.35	6.76	3.80
f e e	$B_{33}L_{31}R_{12}L$	-14.59	1.41	7.60	2.11
f e e	$B_{33}L_{31}R_{12}P$	-14.43	1.49	7.71	2.46
f e e	$R_{31}B_{31}R_{32}P$	-16.74	1.86	7.58	0.39
f e e	$R_{31}R_{32}L_{31}B$	-16.72	1.76	8.39	1.12
f e e	$L_{33}L_{31}B_{32}R$	-8.26	1.27	4.01	4.71
f e e	$L_{33}L_{31}R_{32}L$	-13.60	1.04	6.08	1.21
f e e	$L_{33}L_{31}R_{12}P$	-14.46	1.12	5.65	0.00
f e e	$R_{32}R_{32}L_{32}R$	-13.99	1.91	8.25	3.86
f f f	$L_{32}L_{31}L_{32}L$	-6.72	1.42	4.20	6.58
f f f	$L_{33}L_{31}L_{32}P$	-6.76	1.45	3.79	6.17
f f f	$R_{31}R_{32}R_{32}B$	-15.75	1.68	7.70	1.32
f f f	$R_{32}R_{32}R_{33}R$	-15.98	1.70	9.45	2.86
f f f	$R_{23}R_{32}B_{32}L$	-15.08	1.58	9.01	3.26
f f f	$R_{23}R_{32}B_{32}P$	-10.24	1.64	6.46	3.57
f f f	$L_{33}L_{31}L_{32}B$	-9.25	1.42	5.01	4.88
f f e	$L_{32}L_{31}L_{32}R$	-7.94	1.30	4.30	5.36
f f e	$B_{33}L_{31}L_{32}B$	-14.93	1.41	7.64	1.80
f f e	$R_{32}R_{32}R_{32}P$	-13.80	1.46	5.74	1.09
f f e	$R_{31}R_{32}R_{32}L$	-16.77	1.49	8.11	0.52
f f e	$R_{23}R_{32}B_{32}B$	-11.83	1.62	6.52	4.01
f f e	$R_{23}R_{32}B_{32}R$	-14.03	1.54	8.03	3.24

Tablo 23. *Glu – Leu – Leu – Gly – Gly – Arg – Phe – NH₂* Nöropeptidinin Konformasyonlarının Bağlı Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
fefefe	<i>LLBLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
fefefe	<i>LLBLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
fefefe	<i>BLRRLLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefefe	<i>BLBLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
fefefe	<i>BLRRPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefefe	<i>BLBPLL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefefe	<i>BLBPPL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefefe	<i>BLBPPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
fefefe	<i>BLBPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	2
fefefe	<i>BLBPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefefe	<i>RBBPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
fefefe	<i>RBBPPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
fefefe	<i>BLRBRBB</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefefe	<i>BLBLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefefe	<i>BLBLRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefefe	<i>BLBLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
fefefe	<i>RBBLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefefe	<i>RBBPPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fffffe	<i>RRBPRBB</i>	-	-	-	-	-	1	2
fffffe	<i>RRBPRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
fffffe	<i>RRBPRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fffffe	<i>RRBPBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
fffffe	<i>RRBLPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fffffe	<i>RRRBPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fffffe	<i>RRRBPBR</i>	-	-	-	-	-	2	-
fffffe	<i>RRRBPBB</i>	-	-	-	-	-	1	2
ffffff	<i>RRBPRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffffff	<i>RRBPRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffffff	<i>RRBPRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
ffffff	RRBRPRR	-	-	-	-	-	1	-
ffffff	RRRBPRR	-	-	-	-	-	-	1
ffffff	RRRBPRB	-	-	-	-	-	1	-
ffffff	RRRBPBL	-	-	-	-	-	-	1
ffffee	RRBPRLB	-	-	-	-	-	-	1
ffffee	RRBPBBB	-	-	-	-	-	-	1
ffffee	RRBPBBR	-	-	-	-	-	1	1
ffffee	RRBPBRL	-	-	-	-	-	-	1
ffffee	RRBLLRL	-	-	-	-	-	-	1
ffffee	RRRBLRL	-	-	-	-	-	-	1
ffffee	RRRBLBR	-	-	-	-	-	-	2
ffffee	RRRBLBB	-	-	-	-	-	-	3
ffffee	RRLLRL	-	-	-	-	-	-	1
ffffee	RRRBPLB	-	-	-	-	-	-	1
ffeeffe	LLLBRBB	-	-	-	-	-	-	3
ffeeffe	LLLBRBR	-	-	-	-	-	-	2
ffeeffe	LLLBRRL	-	-	-	-	-	-	1
ffeeffe	RRBBRBB	-	-	-	-	-	-	2
ffeeffe	RRBBBLB	-	-	-	-	-	-	2
ffeeffe	RRBBRBR	-	-	-	-	-	-	2
ffeeffe	RRBBRRL	-	-	-	-	-	-	1
ffeeffe	RRBLRBB	-	-	-	-	-	-	3
ffeeffe	RRBLRBR	-	-	-	-	-	-	2
ffeeffe	BLLBRBB	-	-	-	-	-	-	3
ffeeffe	BLLBRBR	-	-	-	-	-	-	2
ffeeffe	RRRLRBB	-	-	-	-	-	-	3
ffeeffe	RRRLRBR	-	-	-	-	-	-	2
ffeeffe	RRRLRRL	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
ffee fe	RRRLBLB	-	-	-	-	-	-	1
ffee fe	RRRPPBB	-	-	-	-	-	-	3
ffee fe	RRRPPBR	-	-	-	-	-	-	2
ffee fe	LLLBBBL	-	-	-	-	-	-	1
ffee fe	RRRPPRL	-	-	-	-	-	-	1
ffee fe	LLLBRRRL	-	-	-	-	-	-	1
ffee ff	RRBBRBL	-	-	-	-	-	-	1
ffee ff	RRBBRRB	-	-	-	-	-	-	1
ffee ff	RRBBRRR	-	-	-	-	-	-	1
ffee ff	RRBLRBL	-	-	-	-	-	-	1
ffee ff	BLLBRBL	-	-	-	-	-	-	1
ffee ff	BLLBRRB	-	-	-	-	-	-	1
ffee ff	BLLBRRR	-	-	-	-	-	-	1
ffee ff	RRRLRBL	-	-	-	-	-	-	1
ffee ff	RRRPPBL	-	-	-	-	-	-	1
ffee ff	RRRPPRB	-	-	-	-	-	-	1
ffee ee	RRBBBBB	-	-	-	-	-	-	2
ffee ee	RRBBRLB	-	-	-	-	-	-	2
ffee ee	RRBBBBR	-	-	-	-	-	-	2
ffee ee	RRBLBBB	-	-	-	-	-	-	3
ffee ee	RRBLBBR	-	-	-	-	-	-	2
ffee ee	BLLBBBB	-	-	-	-	-	-	3
ffee ee	BLLBBBBR	-	-	-	-	-	-	2
ffee ee	BLLBBRL	-	-	-	-	-	-	1
ffee ee	BLLBRLB	-	-	-	-	-	-	1
ffee ee	RRRLBBB	-	-	-	-	-	-	3
ffee ee	RRRLBBR	-	-	-	-	-	-	2
ffee ee	RRRPLBB	-	-	-	-	-	-	3
ffee ee	RRRPLBR	-	-	-	-	-	-	2

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
ffeeee	RRRPLL	-	-	-	-	-	-	1
ffffef	RRBPBL	-	-	-	-	-	-	1
ffffef	RRBPBR	-	-	-	-	-	-	1
ffffef	RRBLLR	-	-	-	-	-	-	1
ffffef	RRBLRB	-	-	-	-	-	-	1
ffffef	RRBPBB	-	-	-	-	-	-	3
ffffef	RRBLRL	-	-	-	-	-	-	1
ffffef	RRBLRB	-	-	-	-	-	1	-
ffeffe	LLBBBB	-	-	-	-	-	-	3
ffeffe	LLBBBBR	-	-	-	-	-	-	2
ffeffe	LLBLLB	-	-	-	-	-	-	1
ffeffe	LLBPRL	-	-	-	-	-	-	1
ffeffe	LLBPBB	-	-	-	-	-	-	3
ffeffe	LLBPBR	-	-	-	-	-	-	2
ffeffe	RRBBPB	-	-	-	-	-	-	2
ffeffe	RRBLLB	-	-	-	-	-	-	2
ffeffe	RRBLPB	-	-	-	-	-	-	3
ffeffe	RRBLPB	-	-	-	-	-	-	2
ffeffe	RRBBPB	-	-	-	-	-	-	2
ffeffe	BLLPB	-	-	-	-	-	-	3
ffeffe	BLLPB	-	-	-	-	-	-	2
ffeffe	RRRLPB	-	-	-	-	-	2	1
ffeffe	RRRLPB	-	-	-	-	-	-	2
ffeffe	RRRPBL	-	-	-	-	-	-	1
ffeffe	LLBBRL	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	LLBBRB	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	LLBPRB	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	LLBPBL	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	LLBPRR	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
ffefff	<i>RRBBPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	<i>RRBBPRB</i>	-	-	-	-	-	1	-
ffefff	<i>RRBBPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	<i>RRBBPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	<i>RRBLPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	<i>BLLBPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	<i>BLLBPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	<i>RRRLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	<i>RRRPRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefff	<i>LLLBBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefee	<i>RRBBLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefee	<i>RRBBLBB</i>	-	-	-	-	-	-	2
ffefee	<i>RRBBLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
ffefee	<i>RRBLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
ffefee	<i>RRRLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
ffefee	<i>RRRLBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
ffefee	<i>RRRLPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefee	<i>RRRPBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
ffefee	<i>RRRPBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
ffefee	<i>RRRPBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefee	<i>LLLBLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
ffefee	<i>LLLBLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
ffefee	<i>LLLBLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
ffefee	<i>LLLBLPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
fffeee	<i>RRBBLRL</i>	-	-	-	-	-	-	3
fffeee	<i>RRBPLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
fffeee	<i>RRBPLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fffeee	<i>RRBPPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
fffeee	<i>RRBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
fffeee	RRBLRLB	-	-	-	-	-	-	1
fffeee	RRRBBBB	-	-	-	-	-	-	3
fffeee	RRRBBBR	-	-	-	-	-	-	2
fffeee	RRRBBRL	-	-	-	-	-	-	1
fffeee	RRRBRLB	-	-	-	-	-	-	1
fffeef	RRBPLBL	-	-	-	-	-	-	1
fffeef	RRBPLRP	-	-	-	-	-	-	1
fffeef	RRBPLRB	-	-	-	-	-	-	1
fffeef	RRBLBRB	-	-	-	-	-	-	1
fffeef	RRBLBRR	-	-	-	-	-	-	1
fffeef	RRRBBBL	-	-	-	-	-	-	1
fffeef	RRRBBRB	-	-	-	-	-	-	1
fffeef	RRRBLRR	-	-	-	-	-	-	1
fffeff	RRBPPBL	-	-	-	-	-	-	1
fffeff	RRBPPRB	-	-	-	-	-	-	1
fffeff	RRBPPRR	-	-	-	-	-	-	1
fffeff	RRBLRRB	-	-	-	-	-	-	1
fffeff	RRBLRRR	-	-	-	-	-	-	1
fffeff	RRRBRBL	-	-	-	-	-	-	1
fffeff	RRRBRRB	-	-	-	-	-	-	1
fffeff	RRRBRRR	-	-	-	-	-	-	1
ffefef	LLLBLBL	-	-	-	-	-	-	1
ffefef	LLLBLRB	-	-	-	-	-	1	-
ffefef	LLLBLRR	-	-	-	-	-	-	1
ffefef	RRBLLRB	-	-	-	-	-	-	1
ffefef	RRBBLBL	-	-	-	-	-	-	1
ffefef	RRLLRR	-	-	-	-	-	-	1
ffefef	RRBBLRR	-	-	-	-	-	-	1
fefeff	LLBLRBL	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
f e f e f f	<i>LLBLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>LLBLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>RBBLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>RBBLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLBLRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLBLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>RBPPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>RBPPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>RBPPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLPPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLPPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLPPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLRRPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLRRPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLRRPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLBLRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLBLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e f f	<i>BLBLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e e	<i>LLBLRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e e	<i>LLBLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e f e e e	<i>LLBLBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e e	<i>BLRRPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e e	<i>BLBPLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e f e e e	<i>BLBPLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e f e e e	<i>BLBPLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e e	<i>BLBPPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e e e	<i>BLBLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e f e e e	<i>BLRRLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e f e e e	<i>BLRRLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
f e f e e e	<i>BLBLBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e f e e e	<i>RBBLRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e e	<i>RBBPLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e f e e e	<i>RBBPLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e f e e e	<i>RBBPLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e e	<i>RBBPPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e e	<i>BLBPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e f e e e	<i>BLBLPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e f e e e	<i>BLRBPBB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>RRLBRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e e e f e	<i>RRLBRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e f e	<i>RRLBRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>LLRLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e e e f e	<i>LLRLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e f e	<i>RBRLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e e e f e	<i>RBRLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e f e	<i>RBRLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>RBRLBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>LLRLBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>RRLBBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>LLRLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>BLRLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e f e	<i>BLRLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>BLRLBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>BLRPLL B</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>BLRPPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e f e	<i>BLRPPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e f e	<i>BLRPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e e e f e	<i>BLBBRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
f e e f e	<i>BLBBRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e f e	<i>BLBBRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f e	<i>BLBBBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>RRLBRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>RRLBRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>RRLBRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>LLRLRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>LLRLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>LLRLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>RBRLRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>RBRLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>RBRLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>BLBBRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>BLBBRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>BLBBRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>BLRLRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>BLRLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>BLRLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>BLRPPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>BLRPPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e f f	<i>BLRPPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e	<i>RRLBRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e	<i>RRLBBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e e e e	<i>RRLBBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e e	<i>RRLBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e	<i>LLRLRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e	<i>RBRLRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e	<i>LLRLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
f e e e e e	<i>LLRLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e e e	<i>LLRLBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e e	<i>RBRLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e e e e e	<i>RBRLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e e e	<i>RBRLBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e e	<i>BLBBRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e e	<i>BLBBBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e e e e e	<i>BLBBBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e e e	<i>BLBBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e e	<i>BLRLRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e e	<i>BLRLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e e e e e	<i>BLRLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e e e	<i>BLRLBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e e	<i>RLRPLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e e e e e	<i>BLRPLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e e e e e	<i>BLRPLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>LLBLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>LLBLBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>LLBLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>BLRRLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>BLRRLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>BLBLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>BLBLBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>BLBLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>RRRLBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>RBBLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>RBBLBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>RBBLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>RBBLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>BLBLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
f e f e e f	<i>BLRRLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>BLBPBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>BLBPLBR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>BLRPLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f e e f	<i>BLBPLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>RRLBBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>RRLBBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>RRLBBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>LLRLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>LLRLBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>LLRLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>RBRLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>RBRLBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>RBRLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>BLBBBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>BLBBBBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>BLBBBBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>BLRLBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>BLRLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>BLRPLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>BLRPLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e e e e f	<i>BLRPLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f f e e	<i>LLBLLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e f f e e	<i>LLBLLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e f f e e	<i>LLBLLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f f e e	<i>LLRLLLBB</i>	-	-	-	-	-	-	1
f e f f e e	<i>RBRLPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
f e f f e e	<i>RBRLPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
f e f f e e	<i>BLRRBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
feffee	<i>BLRRBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
feffee	<i>BLRRBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffee	<i>BLBPBBB</i>	-	-	-	-	-	1	2
feffee	<i>BLBPBBR</i>	-	-	-	-	-	2	-
feffee	<i>BLBPBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffee	<i>RBBPRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffee	<i>RBBPBBB</i>	-	-	-	-	-	2	1
feffee	<i>RBBLLBB</i>	-	-	-	-	-	1	2
feffee	<i>RBBPBBR</i>	-	-	-	-	-	2	-
feffee	<i>RBBPBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffee	<i>RBBLLBR</i>	-	-	-	-	-	1	1
feffee	<i>RBBLLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffee	<i>BLBLLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
feffee	<i>BLBLLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffee	<i>BLRRLBR</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffee	<i>BLBLPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffef	<i>LLBLLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffef	<i>LLBLLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffef	<i>RBBPBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffef	<i>RBBPBRB</i>	-	-	-	-	-	1	-
feffef	<i>RBBPBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffef	<i>RBBLLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffef	<i>RBBLLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffef	<i>RBBLLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffef	<i>BLBLLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffef	<i>BLRRBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feffef	<i>BLRRBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefffe	<i>LLBLLL</i>	-	-	-	-	-	-	1
fefffe	<i>LLBLPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
feffff	LLBLPBR	-	-	-	-	-	1	1
feffff	LLBLPRL	-	-	-	-	-	-	1
feffff	LLBLPLB	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLBPRBB	-	-	-	-	-	1	1
feffff	BLBLLBB	-	-	-	-	-	1	2
feffff	BLBLPBB	-	-	-	-	-	1	2
feffff	BLBLPBB	-	-	-	-	-	1	3
feffff	BLRRRBB	-	-	-	-	-	-	3
feffff	BLRRRBR	-	-	-	-	-	-	2
feffff	RBBPRBL	-	-	-	-	-	-	1
feffff	RBBPRRB	-	-	-	-	-	-	1
feffff	RBBPRRR	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLBLPBL	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLRLPRB	-	-	-	-	-	-	1
feffff	RBBLPBL	-	-	-	-	-	-	1
feffff	RBBLPRB	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLBLPRR	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLRRPBL	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLRRRRR	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLBPRBL	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLBPRRB	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLRRRRR	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLBLPBR	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLBLPRB	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLBLPRR	-	-	-	-	-	-	1
feefee	RBRLBB	-	-	-	-	-	-	3
feefee	RBRLBR	-	-	-	-	-	-	2
feefee	RBRLRL	-	-	-	-	-	-	1
feefee	LLRLPLB	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
feefee	LLRLLBB	-	-	-	-	-	-	3
feefee	RBRLPLB	-	-	-	-	-	-	1
feefee	BLRPRLB	-	-	-	-	-	-	1
feefee	BLRPBBB	-	-	-	-	-	1	2
feefee	BLRPBBR	-	-	-	-	-	1	1
feefee	BLRPBRL	-	-	-	-	-	-	1
feefee	BLRLLBB	-	-	-	-	-	1	2
feefee	BLRLLBR	-	-	-	-	-	-	2
feefee	BLRLLRL	-	-	-	-	-	-	1
feefee	RRLBPLB	-	-	-	-	-	-	1
feefee	RRLBLBR	-	-	-	-	-	-	2
feefee	RRLBLBB	-	-	-	-	-	-	3
feefee	RRLBLRL	-	-	-	-	-	-	1
feffff	RBBLRBB	-	-	-	-	-	-	3
feffff	BLBLPBB	-	-	-	-	-	-	3
feffff	BLBLPBR	-	-	-	-	-	-	2
feffff	BLBLPRL	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLBBPBB	-	-	-	-	-	-	1
feffff	RBBPRBB	-	-	-	-	-	1	2
feffff	RBBPRBR	-	-	-	-	-	-	3
feffff	RBBPBLB	-	-	-	-	-	-	1
feffff	RBBLPBB	-	-	-	-	-	1	1
feffff	LLBLPBL	-	-	-	-	-	-	1
feffff	LLBLPRR	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLRRRRB	-	-	-	-	-	-	1
fffefe	RRRBRBB	-	-	-	-	-	-	3
fffefe	RRRBRBR	-	-	-	-	-	-	2
fffefe	RRBLRRL	-	-	-	-	-	-	1
feffff	BLRPRBB	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
feeffe	<i>BLRPRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
feeffe	<i>BLRPRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feeffe	<i>BLRPBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
feeffe	<i>BLRLPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
feeffe	<i>BLRLPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
feeffe	<i>BLBBPBR</i>	-	-	-	-	-	-	1
feefff	<i>BLRPRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feefff	<i>BLRLPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
feefff	<i>BLRLPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
feefff	<i>BLRPRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeffe	<i>BBRPRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeffe	<i>BBRPRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeffe	<i>BBRPRBB</i>	-	-	-	-	-	1	2
eeeffe	<i>BBRPRBR</i>	-	-	-	-	-	1	1
eeeffe	<i>BBRPRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeeffe	<i>BBRPRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeffe	<i>BBRPBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeffe	<i>BBBBPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeeffe	<i>BBBBPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeffe	<i>BBBBPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeffe	<i>BBRPRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefff	<i>BBRPRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefff	<i>BBRPRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	<i>BBRPBBB</i>	-	-	-	-	-	2	1
eeefee	<i>BBRPBBR</i>	-	-	-	-	-	1	1
eeefee	<i>BBRPBRR</i>	-	-	-	-	2	1	1
eeefee	<i>BBRPBBB</i>	-	-	-	-	1	1	-
eeefee	<i>BBRPBBR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	<i>BBBBPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eeefee	<i>BBRPRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	<i>BBLLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	<i>BBBLLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeefee	<i>BBBLLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeefee	<i>BBRPRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	<i>BBRPBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	<i>BBRLPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	<i>BRLBLBR</i>	-	-	-	-	-	-	5
eeefee	<i>BRLBLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	<i>BBRRRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeffff	<i>BBRRRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeffff	<i>BBRRRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	<i>BBRRRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefef	<i>BBLLRBL</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeffff	<i>BBLLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	<i>BBBLLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	<i>BBRBLRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	<i>BBRPBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefef	<i>BBRPBRB</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeefef	<i>BBRPBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefef	<i>BBRBRBL</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeeeffe	<i>BBRLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeeeffe	<i>BBRLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeffe	<i>BBRLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeffe	<i>BBRPPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeffe	<i>BBRPLL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeffe	<i>BBRRPBR</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeeeffe	<i>BBBRBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeffe	<i>BBRPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eeccfe	<i>BBRPPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeccfe	<i>BBRPPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeccfe	<i>BBRPLL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeccfe	<i>BBBBRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeccfe	<i>BBBBRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeccfe	<i>BBBBRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeccfe	<i>BBBLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeccfe	<i>BBRPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeccfe	<i>BBRPPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeccfe	<i>BRLBRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeccfe	<i>BRLBRBB</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeccfe	<i>BRLBRRL</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeccfe	<i>BRLBRBB</i>	-	-	-	-	-	-	5
eeccfe	<i>BRLBRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>BRLBBBB</i>	-	-	-	-	-	-	5
eeeeee	<i>BRLBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>BRLBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>BBRLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>BBRLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeeeee	<i>BBRLBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeee	<i>BBRLBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>BBRPLBB</i>	-	-	-	-	-	2	1
eeeeee	<i>BBRPLBB</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeee	<i>BBRPLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>BBRPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>BBRPLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeeeee	<i>BBRPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeeeee	<i>BBRPLBR</i>	-	-	-	-	1	1	-
eeeeee	<i>BBRPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eeeeee	BBBLRLB	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	BBBLBRL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	BBBBBBB	-	-	-	-	-	-	3
eeeeee	BBBBBBR	-	-	-	-	-	-	2
eeeeee	BBRPLBB	-	-	-	-	-	-	3
eeeeee	BBRPLBR	-	-	-	-	-	-	2
eeeeee	BBRPLRL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	BBRPPLB	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBRLPBL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBRLRBL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBRLRRB	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBRPPRB	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBRPPBL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBRPPRB	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBRPPRR	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBBBRBL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBBBRRB	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBBBRRR	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BRLBRBL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BRLBRRR	-	-	-	-	-	1	-
eeeeff	BRLBRBL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BRLBRRR	-	-	-	-	-	-	1
effffe	BRRRRBB	-	-	-	-	-	-	3
effffe	BRRRRBR	-	-	-	-	-	-	2
effffe	BRRRRRL	-	-	-	-	-	-	1
effffe	BBBLRBB	-	-	-	-	-	-	3
effffe	BRBLRBR	-	-	-	-	-	-	3
effffe	BRBLRBR	-	-	-	-	-	-	2
effffe	BRBPRBB	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
effffe	<i>BRBPRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
effffe	<i>BRBPRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effffe	<i>BRBPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
effffe	<i>BRBBPBR</i>	-	-	-	-	-	2	-
effffe	<i>BRBBPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effffe	<i>BRBPBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effffe	<i>BRBPRBB</i>	-	-	-	-	-	-	5
effffe	<i>BRBPBRL</i>	-	-	-	-	-	-	2
efffff	<i>BRRRRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffff	<i>BRRRRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffff	<i>BRBLPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffff	<i>BRBLPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffff	<i>BRBPRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffff	<i>BRBPRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffff	<i>BRBPRRB</i>	-	-	-	-	-	-	2
efffee	<i>BRRRRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffee	<i>BRRRBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
efffee	<i>BRRRBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeff	<i>BRLBRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	<i>BRLBRRR</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeeeff	<i>BRLBRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	<i>BRLBRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effffe	<i>BRRRRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
effffe	<i>BRRRRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
effffe	<i>BRRRRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effffe	<i>BBBLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
effffe	<i>BRBLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	3
effffe	<i>BRBLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
effffe	<i>BRBPRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Bçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
efffee	<i>BBRBLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffee	<i>BBRPBBB</i>	-	-	-	-	-	-	5
efffee	<i>BBRPBBR</i>	-	-	-	-	-	-	3
efffee	<i>BBRPBLB</i>	-	-	-	-	-	-	4
effffe	<i>BBRBPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effffe	<i>BBRBPRB</i>	-	-	-	-	-	1	-
eefefe	<i>BBBLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eefefe	<i>BBRRBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eefefe	<i>BBRRBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eefefe	<i>BBRRBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefefe	<i>BBRRPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eefefe	<i>BBRRPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eefefe	<i>BBRRPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefefe	<i>BBRLLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefefe	<i>BBBLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eefefe	<i>BBBLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefef	<i>BBRPBRB</i>	1	-	-	-	-	-	-
eeefef	<i>BBRPBRR</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeefef	<i>BBBBLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeffe	<i>BBRPBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeffe	<i>BBRLBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeffe	<i>BBRLPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeffe	<i>BBBLLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeffe	<i>BBRPBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBRLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBRLBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBRPLRB</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeeeef	<i>BBRPLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBRPLRB</i>	-	-	-	-	-	1	-

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eeeeef	<i>BBRPLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBRPLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBRPPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBBLBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBBLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBRPLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBRPLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBRPLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBBBBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBBBBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBBBBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BRLBBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffef	<i>BRRRBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffef	<i>BRRRBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffef	<i>BBRBLLR</i>	-	-	-	-	-	-	1
efffef	<i>BRRPBBL</i>	-	-	-	-	-	-	2
efffef	<i>BRRPBRB</i>	-	-	-	-	-	-	2
efffef	<i>BRRPBRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eefeee	<i>BBRRLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eefeee	<i>BBRRLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eefeee	<i>BBRRLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefeee	<i>BBBLBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eefeee	<i>BRBPPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefeee	<i>BRRRLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eefeee	<i>BRRRLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefeee	<i>BRBLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eefeee	<i>BRBLRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefeee	<i>BRRBBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eefeee	<i>BRRBBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
effeee	<i>BRRBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeee	<i>BRRLRL</i>	-	-	-	-	-	-	2
effeee	<i>BRPPLB</i>	-	-	-	-	-	-	2
effeef	<i>BRRLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeef	<i>BRRLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeef	<i>BRRLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeef	<i>BRBLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeef	<i>BRBLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeef	<i>BRBLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeef	<i>BRBBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeef	<i>BRBBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeef	<i>BRBBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeef	<i>BRPLBL</i>	-	-	-	-	-	-	2
effeef	<i>BRPLRB</i>	-	-	-	-	-	-	2
effeef	<i>BRPLRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
effeef	<i>BRPLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeef	<i>BRPLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRPLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRRRPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRRRPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRBLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
effefe	<i>BRBLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
effefe	<i>BRBLBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRBRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
effefe	<i>BRBRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
effefe	<i>BRBRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRPLBB</i>	-	-	-	-	-	-	5
effefe	<i>BRPLBR</i>	-	-	-	-	-	-	3
effefe	<i>BRPLLB</i>	-	-	-	-	-	-	2

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
effefe	<i>BRRPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	5
effefe	<i>BRRPPBR</i>	-	-	-	-	-	-	3
effefe	<i>BRRPPRL</i>	-	-	-	-	-	-	2
effefe	<i>BRBPPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
effefe	<i>BRBPPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
effefe	<i>BRBPPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffee	<i>BBBLLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeffee	<i>BBBLLBR</i>	-	-	-	-	-	1	1
eeffee	<i>BBRRRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRRRPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRRRPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRRRPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRBLRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRBLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRBLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRBPPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>RRBPPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRBPPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRBRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRBRRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRBRRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeff	<i>BRRPPBL</i>	-	-	-	-	-	-	2
effeff	<i>BRRPPRB</i>	-	-	-	-	-	-	2
effeff	<i>BRRPPRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eefeff	<i>BBRRBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefeff	<i>BBRRBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefeff	<i>BBRRPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefeff	<i>BBRRPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eefeff	<i>BBRRPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e e f e f f	<i>BBBLRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBBLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBBLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e f e	<i>BRRLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
e f e e f e	<i>BRRLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e e f e	<i>BRRLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e f e	<i>BRRLRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e f e	<i>BRPPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e f e	<i>BRBBRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
e f e e f e	<i>BRBBRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e e f e	<i>BRBBBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e f e	<i>BRRLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e f e	<i>BRRLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e f e	<i>BRRLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e f f e	<i>BRRLPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
e f e f f e	<i>BRRLPBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f f e f f	<i>BRRBRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f f e f f	<i>BRRPPBL</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f f e f f	<i>BRRPPRB</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f f e f f	<i>BRRPPRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e e f e f f	<i>BBRRBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBRRBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBRRPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBRRPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBRRPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBBLRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBBLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBBLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e f e	<i>BRRLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e fe e fe	<i>BRRLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e fe e fe	<i>BRRLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe e fe	<i>BRRLRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe e e e	<i>BRBBRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe e e e	<i>BBBBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe e e e	<i>BBRLBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe e e e	<i>BRRLBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe e e e	<i>BRRLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
e fe e e e	<i>BRRLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e fe f f f	<i>BRRLPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f f f	<i>BRRLPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f f f	<i>BRPRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f f f	<i>BRBBPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f f f	<i>BRBBPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f e e	<i>BRPBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
e fe f e e	<i>BRPBRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e fe f e e	<i>BRBBLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f e e	<i>BRBBPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f e e	<i>BRLLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
e fe f e e	<i>BRLLBR</i>	-	-	-	-	-	1	1
e fe f e e	<i>BRLLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f e f	<i>BRPBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f e f	<i>BRPBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f e f	<i>BRPBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f e f	<i>BRRLBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe f e f	<i>BRRLBRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe e e f	<i>BRLLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e fe e e f	<i>BRPLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 23'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e f e e e f	<i>BRRLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e f	<i>BRRLRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e f	<i>BRBBBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e f	<i>BRPPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e f	<i>BRPPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f f e f	<i>BRBPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f f e f	<i>BRBPBRB</i>	-	-	-	-	-	1	-
e f f e f	<i>BRBPBR</i>	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 24. *Glu – Leu – Leu – Gly – Gly – Arg – Phe – NH₂* Nöropeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
ffefee	$R_{31}R_{32}B_{32}BPL_{33}R_{32}$	-28.97	1.36	11.23	13.24
ffefee	$R_{32}R_{31}B_{32}BLB_{23}R_{23}$	-35.23	1.19	10.63	6.22
ffefee	$R_{31}R_{32}R_{32}LLB_{32}B_{12}$	-26.40	0.20	10.01	13.43
fffffe	$R_{32}R_{32}B_{32}LPB_{33}R_{32}$	-32.18	0.54	12.34	10.32
fffffe	$R_{32}R_{32}B_{32}PRB_{31}B_{32}$	-29.23	-0.20	9.40	9.59
ffffff	$R_{32}R_{32}B_{32}PPR_{33}B_{22}$	-26.10	-0.20	9.41	12.73
feee fe	$L_{33}L_{31}R_{32}PPB_{33}B_{12}$	-25.55	0.23	6.34	10.63
feee fe	$B_{33}L_{31}R_{12}LRB_{33}B_{12}$	-26.23	-0.15	9.88	13.12
feee fe	$B_{33}L_{31}R_{12}PPB_{33}B_{12}$	-24.90	-0.46	8.81	13.06
feee fe	$B_{13}L_{31}B_{32}BRB_{33}B_{12}$	-31.72	-0.24	8.75	6.41
feee fe	$L_{33}L_{31}R_{32}LRB_{33}B_{12}$	-25.06	0.57	7.86	12.99
feefff	$L_{33}L_{31}R_{32}LPR_{33}B_{22}$	-26.25	0.29	12.05	15.71
feefff	$R_{31}B_{31}R_{32}LPR_{33}B_{22}$	-32.77	-0.06	14.21	11.00
feefff	$B_{13}L_{31}B_{32}BPR_{33}B_{22}$	-25.36	0.24	14.01	18.52
eeeffe	$B_{32}B_{32}B_{12}BPB_{33}R_{12}$	-25.69	-0.19	6.27	10.01
eeeffe	$B_{32}B_{32}R_{32}PRB_{23}R_{32}$	-26.98	0.49	8.08	11.22
eeeffe	$B_{33}B_{32}R_{32}PRB_{23}B_{32}$	-32.32	-2.25	10.04	9.59
effefe	$B_{32}R_{32}R_{32}PRB_{31}B_{32}$	-28.90	0.38	9.36	10.45
eeeffe	$B_{32}R_{32}R_{23}LRB_{33}B_{12}$	-26.21	0.07	9.79	13.27
eeeffe	$B_{32}B_{32}R_{32}PPB_{33}B_{12}$	-28.58	-0.48	8.62	9.19
eeeffe	$B_{33}B_{32}R_{32}LRB_{23}B_{32}$	-29.69	1.86	9.62	11.41
eeeffe	$B_{32}B_{32}B_{12}BRB_{33}B_{12}$	-20.34	-0.32	6.78	15.74
effeff	$B_{32}R_{32}R_{32}BRR_{33}B_{22}$	-25.52	0.40	9.02	13.51
effeff	$B_{32}R_{12}R_{32}RPR_{33}B_{22}$	-25.24	-0.58	10.26	14.06
effeff	$B_{32}R_{33}B_{32}LRR_{33}B_{22}$	-24.96	-0.11	10.98	15.53
fefefe	$R_{31}B_{31}B_{32}LRB_{33}B_{12}$	-28.77	0.27	11.08	12.20
fefefe	$L_{33}L_{31}B_{12}LRB_{33}B_{12}$	-26.81	0.04	9.73	12.57
fefefe	$B_{33}L_{31}B_{32}LRB_{33}B_{12}$	-26.83	-0.14	10.21	12.86

Tablo 24'ün Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
f e f e f e	$B_{33}L_{31}R_{32}RPB_{33}B_{12}$	-22.20	-0.55	6.79	13.66
e e e e e e	$B_{33}R_{32}L_{32}BBB_{33}B_{12}$	-24.02	0.31	8.35	14.26
f e e f e e	$R_{31}R_{32}L_{32}BLB_{33}B_{12}$	-32.81	2.98	10.98	10.77
f f f f e e	$R_{32}R_{32}B_{32}LLB_{23}B_{32}$	-32.43	0.50	12.43	10.13
f f f f e e	$R_{32}R_{32}R_{32}BLB_{23}B_{32}$	-24.89	0.42	7.76	12.91
f e f f f f	$L_{33}L_{31}B_{12}LPB_{23}P_{32}$	-30.55	0.22	10.32	9.61
f e f f f f	$B_{33}L_{31}R_{32}RRR_{33}B_{22}$	-23.75	-0.26	6.31	11.93
f e f f f f	$B_{23}L_{31}B_{32}LPR_{33}B_{22}$	-29.65	0.05	12.13	12.15
e f e e e f	$B_{33}R_{32}R_{32}PLR_{33}B_{22}$	-25.62	0.56	7.18	11.74
e f e e e f	$B_{32}R_{32}B_{32}BBR_{33}B_{22}$	-26.31	-0.14	9.85	13.02
e f f f e f	$B_{33}R_{32}R_{32}BLR_{33}B_{22}$	-27.87	0.72	9.87	12.34
f e f f e e	$R_{31}B_{31}B_{32}LLB_{23}B_{32}$	-32.73	-0.07	10.86	7.68
f e f f e e	$B_{23}L_{31}B_{32}LLB_{31}B_{32}$	-28.30	-0.00	14.21	15.54
f e f f e e	$B_{33}L_{31}R_{32}RBB_{31}B_{32}$	-21.86	-0.64	7.31	14.43
e f e e f e	$B_{32}R_{32}R_{23}PPB_{33}B_{12}$	-24.18	-0.37	6.85	11.92
e f e e f e	$B_{32}R_{32}B_{32}BRB_{33}B_{12}$	-26.50	0.35	10.34	13.82
e f f f f f	$B_{33}R_{32}R_{32}BPR_{32}B_{22}$	-31.34	-0.06	9.28	7.50
e f f f f f	$B_{32}R_{12}R_{32}RRR_{33}B_{22}$	-26.02	-0.33	10.12	13.39
e f f f f f	$B_{32}R_{33}B_{32}LPR_{32}B_{22}$	-29.45	-0.30	13.73	13.60
f e e f f e	$B_{33}L_{31}R_{12}PRB_{33}R_{32}$	-30.26	0.76	9.27	9.39
f e e f f e	$B_{33}L_{31}R_{12}LPB_{23}R_{32}$	-28.20	-0.40	9.57	10.59
f e e f f e	$B_{33}L_{31}L_{32}BRB_{33}B_{12}$	-26.55	0.24	9.86	13.17
f e e f f e	$R_{31}R_{32}R_{32}LRB_{33}B_{12}$	-26.42	0.25	9.50	12.96
f e e f f e	$R_{32}R_{32}R_{32}PPB_{33}B_{12}$	-25.35	0.04	7.63	11.94
f e f e e f	$R_{31}B_{31}B_{32}LBR_{33}B_{23}$	-29.24	0.00	11.06	11.45
f e f e e f	$B_{33}L_{31}B_{32}LBR_{33}B_{22}$	-27.27	-0.43	10.13	12.05
f e f e e f	$L_{33}L_{31}B_{12}LBR_{33}B_{22}$	-27.02	-0.33	9.67	11.94
f e f e e f	$B_{33}L_{31}B_{32}PLR_{33}B_{22}$	-24.91	-0.10	7.69	12.50
f e e e e e	$B_{13}L_{31}B_{32}BBB_{33}B_{12}$	-22.76	-0.46	7.23	14.55
f e e e e e	$L_{33}L_{31}R_{32}PBB_{33}B_{12}$	-26.31	-0.37	10.96	13.90

Tablo 24'ün Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
f e e e e c	$L_{33}L_{31}R_{32}PLB_{23}B_{32}$	-30.33	-1.04	7.87	8.19
f e e e f f	$R_{31}R_{32}L_{32}BRR_{33}B_{22}$	-25.65	-0.76	9.69	14.42
f e e e f f	$R_{31}B_{31}R_{32}LRR_{32}R_{32}$	-30.14	-0.01	12.14	11.64
f f e e f f	$R_{32}R_{31}B_{32}BRR_{33}B_{22}$	-30.09	-0.77	11.91	12.21
f f f e f e	$R_{32}R_{32}B_{32}LRR_{33}B_{12}$	-29.01	-0.22	11.56	12.38
f f f e f e	$R_{31}R_{32}R_{31}BRB_{33}B_{12}$	-26.44	-0.38	9.11	12.66
e e e e f f	$B_{33}R_{33}L_{32}BRR_{32}R_{32}$	-31.64	0.99	9.49	8.46
f f e e e f	$R_{32}R_{31}B_{32}BBR_{33}B_{23}$	-32.24	0.17	9.94	7.48
f f f e e f	$R_{32}R_{32}B_{32}LBR_{33}B_{22}$	-29.13	-0.06	11.37	11.80
f f f e e f	$R_{32}R_{32}B_{32}PLR_{33}B_{22}$	-25.91	0.34	8.94	12.99
f f f e e f	$R_{31}R_{32}R_{31}BBR_{33}B_{22}$	-29.89	-0.14	9.01	8.60
f f f f e f	$R_{31}R_{32}R_{31}BLR_{33}B_{22}$	-27.40	0.38	10.69	13.29
f f f f e f	$R_{32}R_{32}B_{32}PBR_{33}B_{22}$	-35.45	0.66	10.40	5.23
f e e f e f	$L_{33}L_{31}R_{32}LBR_{33}B_{22}$	-25.27	0.20	7.59	12.14
f e e f e f	$B_{33}L_{31}R_{12}LLR_{33}B_{22}$	-30.30	1.16	8.63	9.11
f e e f e f	$R_{31}B_{31}R_{32}LLR_{32}R_{32}$	-27.90	2.40	12.12	16.24
f e e e e f	$R_{31}B_{31}R_{32}LBR_{33}B_{22}$	-28.51	-0.35	10.38	11.14
f e e e e f	$B_{33}L_{31}R_{12}PLR_{33}B_{22}$	-23.59	0.00	8.63	14.66
f e e e e f	$B_{33}L_{31}R_{12}LBR_{33}B_{22}$	-26.41	-0.46	9.71	12.46
f e f f f e	$R_{32}B_{31}B_{32}PRB_{31}B_{32}$	-29.12	-0.03	9.37	9.84
f e f f f e	$B_{33}L_{31}B_{32}LPB_{23}B_{32}$	-28.56	0.09	10.87	12.03
f e f f f e	$L_{33}L_{31}B_{12}LLB_{33}R_{32}$	-30.10	1.84	9.43	10.79
f e f e f f	$B_{23}L_{31}B_{32}LRR_{32}R_{32}$	-29.56	0.19	11.05	11.30
f e f e f f	$B_{33}L_{31}B_{32}PPR_{33}B_{22}$	-25.42	-0.43	8.06	11.84
e e e e e f	$B_{32}R_{33}L_{32}BBR_{33}B_{22}$	-20.81	-0.42	7.50	15.89
e e e e e f	$B_{33}B_{32}R_{32}LBR_{32}R_{32}$	-30.42	0.41	10.41	10.02
e e e e e f	$B_{32}B_{32}B_{12}BBR_{32}B_{22}$	-20.47	-0.63	6.56	15.07
e e e e e f	$B_{32}B_{32}R_{32}PLR_{33}B_{22}$	-31.68	0.52	7.69	6.15

Tablo 24'ün Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağıl E.
e f e f e e	$B_{32}R_{32}R_{32}PBB_{13}B_{32}$	-27.20	-0.46	9.28	11.24
e f e f e e	$B_{32}R_{32}R_{23}LPB_{23}B_{32}$	-28.87	0.52	10.26	11.52
e f e f e e	$B_{32}R_{32}B_{32}BLB_{31}B_{32}$	-29.49	0.32	12.52	12.97
e e e f e e	$B_{32}B_{32}R_{12}PBB_{23}R_{32}$	-27.96	0.59	8.14	10.39
e e e f e e	$B_{32}B_{32}B_{12}BLB_{33}B_{12}$	-22.01	1.13	6.27	15.02
e f f e e f	$B_{33}R_{32}R_{32}BBR_{33}B_{22}$	-25.59	-0.03	9.35	13.36
e f f e e f	$B_{32}R_{32}B_{32}PLR_{33}B_{22}$	-27.45	0.09	10.22	12.48
e f f e e f	$B_{32}R_{32}B_{32}LBR_{33}B_{22}$	-27.04	-0.36	11.09	13.31
e f f e e f	$B_{32}R_{12}R_{32}RLR_{33}B_{22}$	-23.80	-0.21	10.06	15.68
f e f f e f	$B_{33}L_{31}B_{32}PBR_{33}B_{22}$	-34.75	0.23	8.57	3.93
f e f f e f	$B_{33}L_{31}B_{32}LLR_{33}B_{22}$	-34.56	0.38	10.45	5.89
f e f e e e	$B_{33}L_{31}R_{32}RLB_{23}B_{32}$	-22.52	-0.34	7.27	14.02
f f e f f f	$B_{33}L_{31}L_{32}BPR_{33}B_{22}$	-29.24	-0.18	14.65	14.85
e f f e f e	$B_{32}R_{32}B_{32}PPB_{33}B_{12}$	-25.32	-0.28	9.22	13.23
e e f f f e	$B_{32}B_{32}R_{32}RRB_{33}R_{32}$	-28.53	0.44	9.43	10.96
e e f e f e	$B_{32}B_{32}B_{32}LRB_{33}B_{12}$	-26.40	-0.23	10.07	13.06
e f e f e f	$B_{32}B_{32}R_{32}PBR_{33}B_{22}$	-32.03	-0.71	9.42	6.30
e e f f e e	$B_{32}B_{32}R_{32}RBB_{31}B_{32}$	-26.31	-0.68	10.87	13.50
e e e f e f	$B_{33}B_{32}R_{32}PBR_{33}B_{22}$	-38.27	0.20	8.44	0.00
e f f f e e	$B_{32}R_{12}R_{32}RBB_{31}B_{32}$	-25.50	-0.57	10.28	13.83
e f f f e e	$B_{32}R_{33}B_{32}LLB_{33}B_{12}$	-27.28	0.50	13.31	16.15
e e f e e f	$B_{32}B_{32}B_{32}LBR_{33}B_{22}$	-26.68	-0.54	9.92	12.33
e e f e e f	$B_{32}B_{32}R_{32}RLR_{33}B_{22}$	-25.08	-0.21	9.87	10.21
e e f f e f	$B_{32}B_{32}B_{32}LLR_{33}B_{22}$	-31.39	0.07	9.81	8.10
e e f e f f	$B_{32}B_{32}R_{32}RPR_{33}B_{22}$	-25.86	-0.58	9.73	12.91
f f e e e f	$R_{31}R_{32}R_{32}LBR_{33}B_{22}$	-27.72	0.05	9.67	11.62
f f e e e e	$R_{32}R_{32}R_{32}PLB_{23}B_{32}$	-24.89	0.41	7.75	12.89
f f e e e e	$R_{31}R_{32}R_{32}LBB_{33}B_{12}$	-31.13	0.43	9.76	8.69
e f f f e f	$B_{32}R_{32}B_{32}PBR_{33}B_{22}$	-28.78	0.20	8.43	9.47

Tablo 25. $Glu^1Leu^2Leu^3Gly^4Gly^5Arg^6Phe^7NH_2$ molekülünün en düşük enerjili uzay yapısının monopeptid içi ve monopeptid arası karşılıklı etkileşme enerjilerinin değerleri $B_{332}B_{3233}R_{3233}PBR_{3333133}B_{22}$ (kcal/mol).

	Glu^1	Leu^2	Leu^3	Gly^4	Gly^5	Arg^6	Phe^7NH_2
Glu^1	-0.54	-2.90	-0.23	0.05	-1.87	0.42	-0.21
Leu^2		-0.83	-3.21	-0.90	-2.67	-2.82	-0.20
Leu^3			-0.83	-1.32	-1.11	-3.06	-4.03
Gly^4				1.21	0.17	-1.32	-1.04
Gly^5					1.24	-1.24	-0.39
Arg^6						-3.94	-3.58
Phe^7NH_2							-2.90

Tablo 26. Hidrojen Bağı Oluşturan Atom Çiftlerinin Sayısı $B_{332}L_{3133}B_{3233}LBR_{333331}B_{22}$.

Atom grupları	Bağ uzunluğu Å	Enerji (kcal/mol)
$NH(Glu^1), O^1(Gly^5)$	2.51	-0.33
$NH_2(Glu^1), O^1(Glu^1)$	2.37	-0.50
$O^1(Leu^2), NH(Gly^5)$	2.04	-1.09
$O^1(Leu^3), NH(Phe^7)$	2.40	-0.46
$O^1(Gly^4), NH(Arg^6)$	2.51	-0.33
$NH(Phe^7), CO(Phe^7)$	2.30	-0.59
$CO(Phe^4), NH_2$	2.52	-0.33

Tablo 27. $Glu^1Leu^2Leu^3Gly^4Gly^5Arg^6Phe^7NH_2$ molekülünün en düşük enerjili uzay yapısının monopeptid içi ve monopeptid arası karşılıklı etkileşme enerjilerinin değerleri $B_{332}L_{3133}B_{3233}LBR_{333331}B_{22}$ (kcal/mol).

	Glu^1	Leu^2	Gly^3	Gly^4	Gly^5	Arg^6	Phe^7NH_2
Glu^1	-0.49	-2.87	-2.91	-1.70	-0.04	1.94	-2.29
Leu^2		-0.79	-1.87	-0.15	-0.01	-2.64	-0.3
Leu^3			-0.91	-0.85	-3.08	-3.51	-0.97
Gly^4				1.21	0.0	-1.31	-0.50
Gly^5					1.19	-1.11	-0.39
Arg^6						-3.95	-3.53
Phe^7NH_2							-2.91

3.3 $Glu^1 - Trp^2 - Leu^3 - Lys^4 - Gly^5 - Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ Molekülünün Teorik Konformasyon Analizi

Molekülün konformasyon analizi serbest monopeptidlerin konformasyon imkanlarının belirlenmesi ile başlatılmıştır. İlk kademede *Lys* ve *Trp* monopeptidleri için konformasyon haritaları kuruldu ve mümkün olan düşük enerjili durumlar belirlendi. Bunlardan yararlanılarak $Glu^1 - Trp^2$ dipeptidi, $Glu^1 - Trp^2 - Leu^3$ tripeptidi, $Glu^1 - Trp^2 - Leu^3 - Lys^4$ tetrapeptidinin konformasyon imkanları irdelendi. Gly^5 monopeptidinin konformasyon imkanları gözönüne alınarak $Glu^1 - Trp^2 - Leu^3 - Lys^4$ ve $Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ kısımlarının düşük enerjili konformasyonlarının kombinasyonları temelinde, tüm molekülün konformasyon analizi gerçekleştirildi.

3.3.1 *Trp* Monopeptidi

Apolar olan ve 15 atomdan oluşan sıklık yapıya sahip *Trp* monopeptidinin yan zincirinin yönü iki tane iki kat açının değerleri ile belirlenmektedir. Bu açıların torsiyon enerjisinin minimumuna karşılık gelen değerlerinde φ ve ψ açılara göre konformasyon haritaları kuruldu. Haritalarda düşük enerjili durumlara karşılık gelen alanların yer alma oranının, yan zincirin yönelmesine bağlılığı görülmektedir. Genellikle *Trp* monopeptidinin sınırlı konformasyon imkanlarına sahip olduğu gözlemlendi.

Konformasyon haritalarından yararlanarak seçilmiş variantların, tüm açılara göre toplam enerjisinin minimizasyonu sonucu bulunmuş, düşük enerjili konformasyonların

geometrik parametrelerinin deęerleri Tablo 28'de verilmiřtir.

Tablo 28. *Trp*-Monopeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonları.

Biçim	İki Yüzlü Açılar (Derece)				Enerji (kcal/mol)	
	φ_1	χ_1	χ_2	ψ_1	Top. En.	Baęıl En.
1 <i>B</i> ₃₃	-150.35	-178.23	-120.48	148.18	-2.24	0.43
57 <i>B</i> ₃₂	-154.32	-178.90	93.95	149.88	-2.39	0.28
93 <i>B</i> ₃₂	-151.89	-178.77	91.35	149.95	-2.38	0.29
2 <i>B</i> ₃₃	-82.08	-175.86	-165.16	77.73	-1.36	1.31
81 <i>B</i> ₃₂	-152.31	-178.79	95.52	148.41	-2.42	0.25
72 <i>B</i> ₂₂	-153.01	60.93	103.38	163.20	-2.67	0.00
71 <i>B</i> ₁₂	-152.87	59.87	103.74	160.31	-2.65	0.02
66 <i>B</i> ₁₂	-156.11	61.68	107.09	167.18	-2.61	0.06
81 <i>B</i> ₂₂	-156.08	62.62	105.25	166.61	-2.63	0.04
89 <i>R</i> ₃₂	-88.85	179.32	92.72	-55.29	-1.91	0.76
54 <i>R</i> ₃₂	-87.69	178.43	74.23	-57.96	-1.61	1.06
65 <i>R</i> ₃₂	-155.52	-176.91	99.97	-60.11	-1.29	1.38
55 <i>L</i> ₃₂	51.69	-175.31	64.34	69.84	0.48	2.19

3.3.2 *Lys* Monopeptidi

Polar ve büyük yan zincire sahip *Lys*'nin konformasyon haritaları, yan zincirin mümkün yönleri dikkate alınarak kuruldu. Bu haritanın genel sayısı 23 oldu. Haritalardan düşük enerjili durumlara karşılık gelen alanlardan alınmış başlangıç deęerlerinin temelinde, toplam enerjinin minimizasyonu sonucu bulunmuş konformasyonlardan en küçük deęerli baęıl enerjiye sahip olanlarının geometrik parametreleri Tablo 29'da verilmiřtir.

Tablo 29. *Lys*-Monopeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonları.

Biçim	İki Yüzlü Açılar (Derece)										Enerji (kcal/mol)	
	φ_1	χ_1	χ_2	χ_3	χ_4	χ_5	ψ_1	Top. En.	Bağl En.			
38B ₃₃	-145.29	-177.07	176.11	177.92	61.08	-121.18	139.34	2.08	0.06			
58B ₃₃	-139.73	-64.14	-178.37	177.73	60.75	-120.99	159.42	2.02	0.00			
23B ₃₂	-122.59	179.32	61.68	171.21	178.41	-120.57	128.66	2.68	0.66			
59B ₁₂	-158.36	58.61	93.65	176.33	178.89	-120.29	171.25	4.91	2.89			
68B ₁₃	-151.11	57.01	175.21	64.44	174.27	-120.79	162.61	2.57	0.55			
15B ₁₃	-156.06	58.05	-178.59	179.72	179.49	-120.58	163.16	2.05	0.03			
9R ₃₃	-93.88	-177.48	177.57	179.34	179.35	-120.35	-52.97	2.17	0.15			
16R ₁₃	-145.83	45.52	-178.65	179.95	179.18	-120.35	-46.37	4.19	2.17			
24R ₃₂	-88.22	178.22	61.35	171.79	178.48	-121.06	-56.13	2.84	0.82			
50L ₃₃	56.93	-170.39	179.43	178.94	177.89	-121.29	77.44	4.90	2.88			
71L ₁₃	35.57	54.75	173.94	62.79	176.35	-178.45	45.29	30.70	28.68			
92L ₃₃	56.16	-171.18	179.11	179.35	-179.73	-119.74	77.42	5.57	3.55			

3.3.3 $Glu^1 - Trp^2$ Dipeptidi

Glu ve *Trp* monopeptidinin konformasyon imkanlarının belirlenmesi bunlardan oluşan dipeptidin uzay yapısının incelenmesine imkan sağladı. Ana zincirin tüm şekillerini ve biçimlerini kapsayan variantlarda toplam enerjinin iki kat açılarının değerine göre minimizasyonu sonucu bulunmuş konformasyonların bağıl enerjinin değerine göre dağılımı Tablo 30'de verilmiştir. Görüldüğü gibi her iki şekle ait konformasyonlar ayrı tür dağılıma sahip olsalar da, ana zincirin çeşitli biçimlerine ait konformasyonların bağıl enerjinin çeşitli aralıklarında yeralma özellikleri farklıdır.

Bir kaide olarak, *L* tipli yapılardan oluşan konformasyonların bağıl enerjilerinin değerleri büyük olmaktadır. Tablo 31'de düşük enerjili konformasyonların enerji parametrelerinin değeri verilmiştir.

3.3.4 $Glu^1 - Trp^2 - Leu^3$ Tripeptidi

$Glu^1 - Trp^2$ -dipeptidinin ve *Leu* monopeptidinin düşük enerjili durumları temelinde $Glu^1 - Trp^2 - Leu^3$ -tripeptidinin toplam enerjisinin minimizasyonu için başlangıç variantları oluşturuldu. Tüm mümkün olan şekiller ve biçimler gözönüne alındı. Enerjinin minimizasyonu sonucu bulunmuş konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre dağılımı Tablo 32'de en düşük enerjili konformasyonlarının enerji parametrelerinin değerleri Tablo 33'de verilmiştir.

3.3.5 $Glu^1 - Trp^2 - Leu^3 - Lys^4$ Tetrapeptidi

Bu parçanın hesap sonuçları, tüm molekülün uzay yapısının belirlenmesi için çok önemlidir. Molekülü oluşturan monopeptidlerin büyük yan zincire sahip olanlarından çoğunun dahil olduğu tetrapeptidin konformasyon imkanları belirlenirken, büyük ölçüde tüm molekülün konformasyonunu belirleyen yan zincirlerin karşılıklı etkileşmesi irdelenmiş olacaktır. $Glu^1 - Trp^2 - Leu^3$ tripeptidinde konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre belirlenmesi zayıf olduğundan, tetrapeptidin toplam enerjisinin ikikat açılarının değerine göre minimizasyonu için başlangıç variantları oluşturulurken, ana zincirin tüm şekilleri ve biçimleri gözönüne alınmak zorunda kaldı. *Lys* monopeptidinin düşük enerjili konformasyonları ile kombinasyonu sonucu elde edilen ve irdelenen variantların sayısı 784 idi. Enerjinin minimizasyonu sonucu bulunmuş konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre dağılımı Tablo 34'de verilmiştir. Görüldüğü gibi, her bir şekle ait konformasyonlar bağıl enerjinin [0-3

kcal/mol] aralığında yer almaktadır. Konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre elenmesi, ana zincirin biçimlerine ait konformasyonlar arasında, yer almaktadır. Herbir şekle ve biçime ait, en düşük enerjili konformasyonların, enerjik parametrelerinin değerleri Tablo 35'de verilmiştir.

$Glu^1 - Trp^2 - Leu^3 - Lys^4 - Gly^5 - Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ molekülünün teorik konformasyon analizi, $Glu^1 - Trp^2 - Leu^3 - Lys^4$ tetrapeptidinin ve $Arg^6 - Phe^7 - NH_2$ dipeptidinin düşük enerjili konformasyonlarının ve Gly monopeptidinin konformasyon imkanları gözönüne alınarak yapılmıştır. Enerjinin minimizasyonu için variantlar oluşturulurken ana zincirin tüm şekilleri ve biçimlerini kapsayan başlangıç değerleri gözönüne alındı. Toplam enerjinin tüm iki kat açılara göre minimizasyonu sonucu bulunmuş konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre dağılımı Tablo 36'da verilmiştir. Tablodan görüldüğü gibi konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre kesin elenmesi baş vermektedir. Öyle ki, bağıl enerjinin [0-3 kcal/mol] aralığında $efeeef$ şekline ait tek bir konformasyon $B_{323}B_{32}L_{3233}R_{33332}L_{3333133}B_{22}$ yer almaktadır. Diğer düşük enerjili konformasyonlar $eeeeef$ şekline ait $B_{332}B_{22}B_{3133}R_{33332}LR_{3333133}B_{22}$ ($E_{ba} = 3.08kcal/mol$); $ffeeef$ şekline ait $R_{332}R_{32}B_{3133}B_{13332}BR_{3333133}B_{22}$ ($E_{ba} = 4.31kcal/mol$); $ffeeff$ şekline ait $R_{332}B_{33}L_{3233}R_{3333}PR_{3333133}B_{22}$ ($E_{ba} = 4.60kcal/mol$) ve $feefef$ şekline ait $B_{332}L_{32}B_{3133}R_{13332}BR_{3333133}B_{22}$ ($E_{ba} = 4.79kcal/mol$) konformasyonlarıdır. Bunların dışındaki tüm konformasyonların bağıl enerjilerinin değerleri 5 kcal/mol'dan büyük olmaktadır.

Ana zincirin genel biçimini belirleyen herbir şekle ve biçimlere ait en düşük enerjiye sahip konformasyonların enerjik parametreleri Tablo 37'de verilmiştir. En düşük enerjiye sahip konformasyonun monopeptidler arası ve monopeptid içi etkileşme enerjilerinin değerleri Tablo 38'de verilmiştir. Lys^4 ve Arg^6 'nın yan zincirleri arasında elektrostatik itme ve Glu^1 ve Phe^7 monopeptidleri arasında güçlü Van der Vals teması bu konformasyonun esas özelliğidir. Başka bir özellik Leu^3 , Lys^4 ve Gly^5 'de monopeptid içi etkilerin bozucu olmasıdır. Demek ki, uzak monopeptidler arası kararlaştırıcı etkiler az da olsa, bu monopeptidlerin yapısının gerginleşmesi hesabına oluşmaktadır. Önemli olan hidrojen bağlarının geometrik ve enerjik parametrelerinin değerleri Tablo 39'de görülmektedir. Bu konformasyona uygun ikikat açılarının değerleri ve atomların koordinatları Tablo E5'de ve Tablo E6'de verilmiştir. Görüldüğü gibi, bir çok ω iki kat açılarının, torsiyon enerjinin minimumuna karşılık gelen 180.00° değerinden aşağı yukarı 20° kadar sapma görülmektedir. Bu Van der Vals temasları oluşurken peptid bağının düzlem yapısının bozulduğunu gösterir.

Tablo 30. *Glu – Trp* Dipeptidinin Konformasyonlarının Bağlı Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e	<i>BB</i>	28	82	52	12	5	1	-
e	<i>BR</i>	-	8	25	21	2	4	-
e	<i>RL</i>	-	-	8	6	-	-	-
e	<i>LB</i>	-	-	6	2	1	1	-
e	<i>LR</i>	-	-	-	2	-	-	-
f	<i>BL</i>	-	-	9	8	5	1	-
f	<i>RB</i>	21	24	40	23	3	1	-
f	<i>RR</i>	-	7	15	12	6	1	-
f	<i>LL</i>	-	-	-	2	-	-	-

Tablo 31. *Glu – Trp* Dipeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
e	<i>B₃₂B₂₂</i>	-6.90	0.01	1.03	0.00
e	<i>B₃₂R₃₂</i>	-7.61	0.52	2.84	1.6
e	<i>R₃₃L₃₂</i>	-7.63	0.62	3.77	2.62
e	<i>L₃₂B₂₂</i>	-6.41	0.13	3.01	2.60
e	<i>L₃₃R₃₂</i>	-6.52	0.52	3.46	3.32
f	<i>B₂₃L₃₂</i>	-6.83	0.65	3.65	2.33
f	<i>R₃₃B₁₂</i>	-8.52	0.44	3.11	0.90
f	<i>R₃₃R₃₂</i>	-9.03	0.86	4.19	1.88
f	<i>L₂₃L₃₃</i>	-6.11	0.44	2.93	3.12

Tablo 32. *Glu - Trp - Leu* Tripeptidinin Konformasyonlarının Bağlı Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
f e	<i>BLB</i>	-	-	2	2	4	11	-
f e	<i>BLR</i>	-	-	1	-	3	7	-
f e	<i>RBB</i>	-	9	13	23	13	13	1
f e	<i>RBR</i>	1	7	5	4	13	11	-
f e	<i>LLB</i>	-	-	2	2	4	6	-
f e	<i>LLR</i>	1	1	1	2	1	2	-
f e	<i>RRL</i>	-	-	-	-	1	2	-
ff	<i>BLL</i>	-	1	-	-	1	7	-
ff	<i>BLL</i>	-	1	-	-	1	-	-
ff	<i>LLL</i>	-	-	-	-	2	1	-
ff	<i>RRR</i>	1	2	3	4	1	5	-
ff	<i>RRB</i>	-	3	4	8	1	8	-
ff	<i>RBL</i>	-	-	1	2	3	2	-
ef	<i>LRB</i>	-	-	-	-	3	4	-
ef	<i>LRR</i>	-	1	-	-	2	2	-
ef	<i>LBL</i>	-	-	-	-	1	2	-
ef	<i>RLL</i>	-	-	1	-	-	-	-
ef	<i>BBL</i>	-	-	3	2	4	-	-
ef	<i>BRB</i>	-	-	2	4	7	14	-
ef	<i>BRR</i>	-	1	2	4	8	4	-
ee	<i>RLB</i>	1	-	1	-	1	-	-
ee	<i>BBB</i>	6	16	19	13	13	8	-
ee	<i>BBR</i>	4	8	11	12	8	3	-
ee	<i>LRL</i>	-	-	-	-	-	1	-
ee	<i>RLR</i>	-	-	-	-	2	4	-
ee	<i>RLB</i>	-	-	-	1	4	3	-
ee	<i>LBB</i>	-	-	2	4	5	12	-
ee	<i>LBR</i>	-	1	-	2	4	8	-
ee	<i>BRL</i>	-	-	-	-	-	4	-

Tablo 33. *Glu – Trp – Leu* Tripeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
f e	$B_{33}L_{32}B_{32}$	-10.85	0.79	4.43	2.54
f e	$B_{33}L_{32}R_{32}$	-10.33	0.76	3.91	2.50
f e	$B_{32}B_{32}B_{32}$	-11.25	0.85	3.93	1.59
f e	$R_{33}B_{33}R_{32}$	-12.69	1.15	4.05	0.67
f e	$L_{33}L_{33}B_{32}$	-12.91	0.99	5.85	2.09
f e	$L_{33}L_{32}R_{32}$	-12.92	0.83	4.67	0.74
f e	$R_{31}R_{32}L_{32}$	-10.78	1.05	5.66	4.08
f f	$B_{33}L_{32}L_{32}$	-14.65	0.85	7.18	1.54
f f	$L_{33}L_{33}L_{32}$	-11.60	0.94	6.72	4.22
f f	$R_{33}R_{32}R_{32}$	-13.18	1.03	4.46	0.47
f f	$R_{33}R_{32}B_{32}$	-12.79	1.10	4.71	1.17
f f	$R_{33}B_{33}L_{32}$	-11.45	9.81	4.85	2.37
e f	$L_{33}R_{32}B_{32}$	-8.53	0.59	4.05	4.28
e f	$L_{33}R_{32}R_{32}$	-12.75	0.56	5.90	1.86
e f	$L_{33}B_{32}L_{32}$	-8.78	0.68	4.20	4.26
e f	$R_{33}L_{32}L_{32}$	-13.42	0.70	6.96	2.40
e f	$B_{32}B_{32}L_{32}$	-9.78	0.43	3.62	2.43
e f	$B_{31}R_{32}B_{32}$	-10.87	0.51	4.22	2.02
e f	$B_{31}R_{32}R_{32}$	-11.48	0.39	4.12	1.19
e e	$R_{33}L_{33}B_{32}$	-12.81	1.12	4.31	0.79
e e	$B_{32}B_{32}B_{32}$	-11.03	0.62	2.63	0.39
e e	$B_{32}B_{32}R_{32}$	-11.77	0.64	2.97	0.00
e e	$L_{33}R_{32}L_{32}$	-7.74	1.09	5.38	6.84
e e	$R_{33}L_{32}R_{12}$	-9.35	0.97	4.74	4.52
e e	$R_{33}L_{32}B_{12}$	-12.78	1.01	7.12	3.51
e e	$L_{33}B_{32}B_{32}$	-10.51	0.93	3.61	2.19
e e	$L_{33}B_{32}R_{32}$	-10.76	0.92	3.52	1.84
e e	$B_{31}B_{32}L_{32}$	-9.69	1.00	5.68	5.15

Tablo 34. *Glu – Trp – Leu – Lys* Tetrapeptidinin Konformasyonlarının Bağıl Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eee	BBBB	-	2	11	24	17	36	2
eee	BBBR	-	2	2	7	13	13	1
eee	BBRL	-	-	2	5	-	4	3
eee	BBLB	-	-	-	-	-	3	4
eee	BRLR	-	-	-	-	-	-	2
eee	BLBB	-	-	-	-	-	7	-
eee	RLBR	-	-	-	-	-	3	-
eee	RLRL	-	-	-	-	-	3	-
eee	LBBB	-	-	-	1	2	4	-
eee	LBBR	-	-	-	1	1	1	-
eee	LBRL	-	-	-	-	2	-	1
eeef	BBBL	1	-	-	4	15	17	-
eeef	BBRB	-	1	1	8	7	12	1
eeef	BBRR	-	1	3	3	4	6	-
eeef	BRLL	-	-	-	-	-	-	3
eeef	RLBL	-	-	-	-	-	3	-
eeef	RLRB	-	-	-	-	-	7	-
eeef	RLRR	-	-	-	-	-	3	-
eeef	LBBL	-	-	-	-	1	2	-
eeef	LBRB	-	-	-	1	-	3	-
eeef	LBRR	-	-	-	1	1	1	-
efe	BBLR	-	-	1	-	2	3	-
efe	BBLB	-	-	-	1	-	11	2
efe	BRRL	-	1	3	2	-	1	-
efe	BRBB	-	-	2	1	-	4	-
efe	BRBR	-	-	-	-	-	3	-
efe	LBLB	-	-	-	-	-	5	2
efe	LBLR	-	-	-	-	-	2	-
efe	LRBB	-	-	-	1	3	2	-

Tablo 34'ün Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e fe	<i>RLLR</i>	-	-	-	-	1	2	-
e fe	<i>RLLB</i>	-	-	-	1	1	4	-
e fe	<i>LRBR</i>	-	-	-	-	-	3	-
e fe	<i>LRRL</i>	-	-	-	-	1	1	-
eff	<i>BBLL</i>	-	-	-	-	-	6	-
eff	<i>BRRB</i>	-	2	1	1	4	8	-
eff	<i>BRRR</i>	-	-	-	1	3	4	-
eff	<i>BRBL</i>	-	-	-	-	2	1	-
eff	<i>LBLL</i>	-	-	-	-	-	3	-
eff	<i>LRBL</i>	-	-	-	-	1	3	-
eff	<i>LRRB</i>	-	-	-	-	1	3	-
eff	<i>LRRR</i>	-	-	-	-	-	2	-
eff	<i>RLLL</i>	-	-	1	-	-	3	-
fff	<i>RRBL</i>	-	1	-	-	2	3	-
fff	<i>RRRB</i>	-	-	1	3	1	6	-
fff	<i>R BLL</i>	-	-	-	-	-	2	-
fff	<i>RRRR</i>	-	-	-	1	3	2	-
fff	<i>BLLL</i>	-	-	-	-	-	6	1
fff	<i>LLLL</i>	-	-	-	-	-	3	1
ffe	<i>BLLB</i>	-	-	-	-	-	12	2
ffe	<i>RRBB</i>	-	4	3	1	4	2	-
ffe	<i>RRBR</i>	-	-	1	3	-	2	-
ffe	<i>RBLB</i>	-	-	-	2	2	3	-
ffe	<i>RBLR</i>	-	-	-	1	1	1	-
ffe	<i>BLLB</i>	-	-	-	-	-	6	-
ffe	<i>RRRL</i>	-	-	-	-	-	3	-
ffe	<i>LLLB</i>	-	-	-	1	1	4	-
ffe	<i>LLLR</i>	-	-	-	-	-	3	-
fef	<i>BLBL</i>	-	-	-	-	2	-	-
fef	<i>BLRB</i>	-	-	2	2	2	8	-

Tablo 34'ün Devamı

fef	<i>BLRR</i>	-	-	1	1	-	4	-
fef	<i>RBRB</i>	-	1	3	3	3	9	1
fef	<i>RBBL</i>	-	-	3	2	6	4	-
fef	<i>RBRR</i>	-	-	2	3	1	6	-
fef	<i>LLRB</i>	-	-	-	2	-	3	-
fef	<i>LLRR</i>	-	-	1	1	-	1	-
fef	<i>LLBL</i>	-	-	-	-	1	3	-
fee	<i>BLBB</i>	1	2	-	2	2	-	-
fee	<i>BLBR</i>	-	-	1	1	1	-	-
fee	<i>BLRR</i>	1	1	-	1	-	3	-
fee	<i>RBBB</i>	-	5	4	3	10	13	-
fee	<i>RBBR</i>	-	-	1	4	1	8	-
fee	<i>RBRR</i>	-	2	-	2	2	5	1
fee	<i>LLBB</i>	-	-	1	2	1	1	-
fee	<i>LLBR</i>	-	-	1	-	-	2	-
fee	<i>LLRL</i>	-	3	-	-	-	3	-

Tablo 35. *Glu – Trp – Leu – Lys* Tetrapeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekil	Biiim	EN	EE	ET	Bağıl E.
eee	$B_{33}B_{22}B_{32}B_{23}$	-15.55	2.53	3.57	1.66
eee	$B_{32}B_{32}B_{32}R_{33}$	-19.76	2.11	7.92	1.38
eee	$B_{32}B_{32}R_{32}L_{33}$	-16.65	2.23	5.30	2.00
eee	$B_{32}R_{32}L_{32}B_{23}$	-12.10	3.20	6.72	8.94
eee	$B_{32}R_{32}L_{32}R_{13}$	-8.92	2.69	5.70	10.59
eee	$R_{33}L_{32}B_{12}B_{23}$	-13.51	2.97	5.70	6.27
eee	$R_{33}L_{32}B_{12}R_{32}$	-11.57	2.97	7.94	6.64
eee	$R_{33}L_{32}R_{12}L_{13}$	-17.69	2.15	10.43	6.21
eee	$L_{33}B_{32}B_{32}B_{23}$	-15.85	2.49	5.68	3.88
eee	$L_{33}B_{32}B_{32}R_{23}$	-17.50	2.50	7.72	3.84
eee	$L_{33}B_{32}R_{32}L_{33}$	-14.41	2.60	5.35	4.66
ee f	$B_{32}B_{33}B_{32}L_{13}$	-21.63	1.19	9.52	0.19
ee f	$B_{23}B_{32}R_{32}B_{31}$	-19.59	2.43	7.96	1.92
ee f	$B_{32}B_{32}R_{32}R_{33}$	-14.54	1.79	3.25	1.66
ee f	$B_{32}R_{32}L_{32}L_{33}$	-7.32	2.53	5.46	11.77
ee f	$R_{33}L_{32}B_{12}L_{33}$	-16.38	2.65	8.66	6.04
ee f	$R_{33}L_{32}R_{12}B_{23}$	-12.94	2.97	5.43	6.57
ee f	$R_{33}L_{32}R_{12}R_{13}$	-11.40	2.89	5.25	7.85
ee f	$L_{33}B_{32}B_{32}L_{33}$	-12.88	2.28	4.49	4.99
ee f	$L_{33}B_{32}R_{32}B_{33}$	-13.53	2.30	4.01	3.89
ee f	$L_{33}B_{32}R_{32}R_{33}$	-13.46	2.19	3.81	3.64
e f e	$B_{32}B_{32}L_{32}R_{32}$	-17.95	2.14	6.920	2.22
e f e	$B_{32}B_{32}L_{33}B_{23}$	-14.90	1.98	5.18	3.38
e f e	$B_{32}R_{32}R_{32}L_{13}$	-19.83	2.34	8.22	1.84
e f e	$B_{31}R_{32}B_{32}B_{23}$	-16.54	2.04	6.18	2.79
e f e	$B_{31}R_{32}B_{32}R_{33}$	-12.56	2.01	4.49	5.05
e f e	$L_{33}B_{33}L_{32}B_{23}$	-13.03	2.59	5.89	6.56
e f e	$L_{33}B_{33}L_{32}R_{33}$	-12.74	2.16	4.65	5.18

Tablo 35'in Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
e f e	$L_{33}R_{32}B_{32}B_{13}$	-16.38	2.30	6.57	3.59
e f e	$R_{33}L_{32}L_{32}R_{33}$	-14.38	2.35	5.53	4.61
e f e	$R_{33}L_{32}L_{32}B_{13}$	-14.88	2.10	5.56	3.89
e f e	$L_{33}R_{32}B_{32}R_{13}$	-15.80	2.26	7.68	5.25
e f e	$L_{33}R_{32}R_{32}L_{33}$	-15.23	2.30	6.64	4.83
e f f	$B_{32}B_{32}L_{32}L_{33}$	-13.90	2.63	5.80	5.64
e f f	$B_{33}R_{32}R_{32}B_{33}$	-19.38	2.82	7.02	1.56
e f f	$B_{31}R_{32}R_{32}R_{33}$	-14.80	3.10	4.11	3.53
e f f	$B_{31}R_{32}B_{32}L_{33}$	-15.57	2.05	6.94	4.53
e f f	$L_{33}B_{33}L_{33}L_{33}$	-9.43	3.84	5.23	10.75
e f f	$L_{33}R_{32}B_{32}L_{13}$	-17.97	1.86	9.55	4.55
e f f	$L_{33}R_{32}R_{32}B_{32}$	-14.12	2.98	4.77	4.74
e f f	$L_{33}R_{33}R_{32}R_{33}$	-13.83	3.27	4.50	5.05
e f f	$R_{33}L_{32}L_{31}L_{31}$	-16.42	2.09	5.70	2.47
f f f	$R_{33}R_{32}R_{32}L_{13}$	-20.95	1.88	9.17	1.22
f f f	$R_{31}R_{31}R_{12}B_{23}$	-18.17	2.62	7.09	2.66
f f f	$R_{33}B_{33}L_{32}L_{33}$	-11.61	3.09	6.13	8.72
f f f	$R_{33}R_{32}R_{32}R_{33}$	-16.42	3.18	5.29	3.16
f f f	$B_{33}L_{32}L_{32}L_{33}$	-13.24	2.40	5.94	6.21
f f f	$L_{33}L_{33}L_{32}L_{13}$	-15.10	2.57	6.52	5.11
f f e	$B_{33}L_{32}L_{32}B_{13}$	-12.65	2.26	4.85	5.56
f f e	$R_{33}R_{32}B_{32}B_{23}$	-18.30	2.58	5.99	1.38
f f e	$R_{33}R_{32}B_{31}R_{13}$	-16.09	2.57	5.20	2.79
f f e	$R_{33}B_{33}L_{32}B_{32}$	-15.61	2.43	5.21	3.16
f f e	$B_{33}B_{33}L_{32}R_{33}$	-15.40	2.49	5.46	3.67
f f e	$R_{33}R_{32}R_{32}L_{33}$	-21.58	2.71	7.76	0.00
f f e	$L_{33}L_{33}L_{32}B_{33}$	-17.01	2.73	7.14	3.98
f f e	$L_{33}L_{33}L_{32}R_{33}$	-13.80	2.41	5.58	5.31

Tablo 35'in Devamı

Şekil	Birim	EN	EE	ET	Bağıl E.
f f e	$B_{33}L_{32}B_{32}L_{33}$	-14.07	2.05	5.29	4.38
f f e	$B_{33}L_{32}R_{32}B_{33}$	-16.39	2.09	5.28	2.10
f f e	$B_{33}L_{32}R_{32}R_{33}$	-14.69	1.98	4.39	2.79
f f e	$R_{33}B_{33}R_{32}B_{23}$	-17.62	3.62	4.01	1.12
f f e	$R_{33}B_{33}B_{32}L_{13}$	-16.38	1.65	5.91	2.39
f f e	$R_{33}B_{33}R_{32}R_{33}$	-16.03	2.57	4.51	2.13
f f e	$L_{33}L_{32}R_{32}B_{33}$	-14.88	2.12	4.69	3.05
f f e	$L_{33}L_{32}R_{32}R_{33}$	-15.19	2.07	4.53	2.51
f f e	$L_{33}L_{33}B_{32}L_{32}$	-12.51	2.12	4.02	4.71
f e e	$B_{33}L_{32}B_{32}B_{13}$	-19.74	2.35	6.73	0.45
f e e	$B_{33}L_{32}B_{31}R_{13}$	-16.38	2.18	5.53	2.44
f e e	$B_{33}L_{32}R_{32}L_{33}$	-22.96	2.38	10.27	0.80
f e e	$R_{33}B_{33}B_{32}B_{13}$	-17.70	2.58	5.08	1.06
f e e	$R_{33}B_{33}B_{32}R_{13}$	-16.49	2.49	4.99	2.10
f e e	$R_{33}B_{33}R_{32}L_{33}$	-19.43	2.67	6.80	1.15
f e e	$L_{33}L_{33}B_{32}B_{23}$	-15.38	2.46	4.45	2.64
f e e	$L_{33}L_{23}B_{31}R_{33}$	-17.93	2.32	7.00	2.52
f e e	$L_{33}L_{32}R_{32}L_{33}$	-19.71	2.35	7.49	1.24

Tablo 36. *Glu - Trp - Leu - Lys - Gly - Arg - Phe - NH₂* Nöropeptidinin Konformasyonlarının Bağlı Enerjilerinin Değerlerine Göre Dağılımı.

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eeeeee	<i>LBBBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>LBBRLB</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeee	<i>LBBBBBB</i>	-	-	-	-	-	1	3
eeeeee	<i>BBBBBBB</i>	-	-	-	-	-	-	4
eeeeee	<i>BBBBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeee	<i>BBBRLBB</i>	-	-	-	-	1	2	4
eeeeee	<i>BBBRLRL</i>	-	-	-	-	-	1	3
eeeeee	<i>BBBBRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>BBBBBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeee	<i>BBBRBBR</i>	-	-	-	-	-	-	4
eeeeee	<i>BBBRLBR</i>	-	-	-	-	-	1	1
eeeeee	<i>BBRLRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>BBRLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	5
eeeeee	<i>BBRLBRL</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeee	<i>BBBRPLB</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeee	<i>BBRLBBR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeee	<i>BBRLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeeeef	<i>BBBBBBL</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeeeef	<i>BBBBBRR</i>	-	-	-	-	-	1	1
eeeeef	<i>LBBBBRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeef	<i>BBBRLRR</i>	-	-	-	-	-	1	2
eeeeef	<i>BBBBBBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBBRBRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBBRLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	<i>BBBRLRB</i>	-	-	-	1	-	-	-
eeeeef	<i>BBRLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeeeef	<i>BBRLBRB</i>	-	-	-	-	-	1	-

Tablo 36'nın Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eeeeef	BBRLBRR	-	-	-	-	-	-	1
eeeeef	LBBBBRB	-	-	-	-	-	-	1
eeeefe	BBBBRBB	-	-	-	-	-	-	3
eeeefe	BBBBRRL	-	-	-	-	-	-	1
eeeefe	LBBBBLB	-	-	-	-	-	-	1
eeeefe	LBBBBRBB	-	-	-	-	-	1	3
eeeefe	BBRLLB	-	-	-	-	-	1	3
eeeefe	BBRPBB	-	-	-	-	-	-	2
eeeefe	BBRPRL	-	-	-	-	-	-	2
eeeefe	BBBBRBR	-	-	-	-	-	-	2
eeeefe	BBBBLB	-	-	-	-	-	-	1
eeeefe	BBRLRBB	-	-	-	-	-	-	4
eeeefe	BBRLRBR	-	-	-	-	-	1	4
eeeefe	BBRLRRL	-	-	-	-	-	1	2
eeeefe	BBRLBBR	-	-	-	-	-	-	1
eeeefe	BBRLBLB	-	-	-	-	-	-	1
eeeefe	LBBBBRL	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	BBBBLBB	-	-	-	-	-	-	7
eeefee	BBBBLRL	-	-	-	-	-	-	3
eeefee	LBBBPLB	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	BBBRBBB	-	-	-	-	-	-	8
eeefee	BBBBLBR	-	-	-	-	-	-	4
eeefee	BBBBPLB	-	-	-	-	-	-	3
eeefee	BBBRRLB	-	-	-	-	-	-	4
eeefee	BBRLPLB	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	LBBBLRL	-	-	-	-	-	-	1
eeefee	BBRLLBB	-	-	-	-	-	-	6
eeefee	BBRLLBR	-	-	-	-	-	-	4
eeefee	BBRLLRL	-	-	-	-	-	-	2
eeefee	LBRBLBB	-	-	-	-	-	-	4
eeefee	BBRRLBR	-	-	-	-	-	-	2
eeefee	BBRBBBB	-	-	-	-	-	-	3
eeefee	BBRBBBB	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 36'nın Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e f e e e	<i>BBRBBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e e e	<i>BBRBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>BBRRPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>LBRRLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>LBRBBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
e f e e e	<i>LBRBBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e e e	<i>LBRBLBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
e f e e e	<i>LBRRLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e e e	<i>LBRBBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>LBRBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>BBRBBBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e e e	<i>BBRBRLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>BBRBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>BBRRLBB</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e e e	<i>BBRRLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>BBBLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	4
e f e e e	<i>BBBLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>BBRRPLB</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e e e	<i>BBBLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>BBBLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>BBRRLBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e e e	<i>BBRRLRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e e e	<i>BRBRLBR</i>	-	-	-	-	-	1	1
e f e e e	<i>RLLBBBB</i>	-	-	-	-	-	1	5
e f e e e	<i>RLLBRBR</i>	-	-	-	-	-	-	4
e f e e e	<i>RLLBBBR</i>	-	-	-	-	-	-	4
e f e e e	<i>RLLBBRL</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e e e	<i>RLLBRLB</i>	-	-	-	-	-	-	2

Tablo 36'nın Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
efeeee	LBLBBBR	-	-	-	-	-	-	1
efeeee	BRRLBBB	-	-	-	-	-	-	3
efeeee	BBLRLBB	-	-	-	-	-	-	3
efeeee	BBLBPLB	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBBBRBL	-	-	-	-	-	-	2
eeeeff	BBBBRRR	-	-	-	-	-	-	3
eeeeff	BBBRPRR	-	-	-	-	-	-	3
eeeeff	BBBBRRB	-	-	-	-	-	1	1
eeeeff	BBBRPBL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	BBBRPRB	-	-	-	-	-	1	-
eeeeff	BBRLRBL	-	-	-	-	-	-	3
eeeeff	BBRLRRB	-	-	-	-	-	1	2
eeeeff	BBRLRRR	-	-	-	-	-	1	2
eeeeff	LBBBRRR	-	-	-	-	-	-	2
eeeeff	LBBBRBL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	LBBBRBL	-	-	-	-	-	-	1
eeeeff	LBBBRB	-	-	-	-	-	-	1
eeefef	BBBBLBL	-	-	-	-	-	-	3
eeefef	BBBBLRL	-	-	-	-	-	-	3
eeefef	BBRLBL	-	-	-	-	-	-	1
eeefef	BBBBLRB	-	-	-	-	-	3	-
eeefef	BBRLBL	-	-	-	-	-	-	2
eeefef	BBRLLRB	-	-	-	-	-	1	1
eeefef	BBRLRRR	-	-	-	-	-	-	2
eeefef	LBBBBLR	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	BBLLRB	-	-	-	-	-	1	-

Tablo 36'nin Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
eefeef	BBLLRR	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	BBRBBBL	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	BBRBBRB	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	BBRBBRR	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	BBRRLBL	-	-	-	-	-	-	2
eefeef	BBRRLRR	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	LBBBBBL	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	LBRBBRB	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	LBRRLBL	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	LBRRLRB	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	LBRRLRR	-	-	-	-	-	-	1
eefeef	LBRBBRR	-	-	-	-	-	-	1
eeeffe	LBBLLB	-	-	-	-	-	-	1
eeeffe	BBBBPBB	-	-	-	-	-	2	5
eeeffe	BBBBPRL	-	-	-	-	-	3	-
eeeffe	BBRRBB	-	-	-	-	-	-	9
eeeffe	BBRRRL	-	-	-	-	-	-	4
eeeffe	BBRRBRL	-	-	-	-	-	-	4
eeeffe	BBRRRBR	-	-	-	-	-	-	4
eeeffe	BBBBLLB	-	-	-	-	-	-	3
eeeffe	BBBBPBR	-	-	-	-	-	-	4
eeeffe	BBBRPBR	-	-	-	-	-	1	2
eeeffe	BBBRBLB	-	-	-	-	-	-	2
eeeffe	BBRLPBB	-	-	-	-	-	1	8
eeeffe	BBRLPBR	-	-	-	-	-	-	6
eeeffe	BBRLPRL	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 36'nın Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e e e f f e	BBRLLLB	-	-	-	-	-	-	3
e e e f f e	BBRLLBR	-	-	-	-	-	-	2
e e e f f e	LBBBPBB	-	-	-	-	-	-	4
e e e f f e	LBBLLLB	-	-	-	-	-	-	1
e e e f f e	LBBBBLB	-	-	-	-	-	-	1
e e e f f e	LBBBPRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f e	BBRRPBR	-	-	-	-	-	1	1
e e f e f e	BBBLRBB	-	-	-	-	-	-	3
e e f e f e	BBBLRBR	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f e	BBRLLLB	-	-	-	-	-	-	2
e e f e f e	BBRRPRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f e	BBRBRBB	-	-	-	-	-	-	3
e e f e f e	BBRBRBR	-	-	-	-	-	-	2
e e f e f e	BBBRRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f e	BBRBBLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f e	LBRLLLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f e	LBRBBLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f e	LBRBRRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f e	LBRBRBR	-	-	-	-	-	-	2
e e f e f e	LBRBRBB	-	-	-	-	-	-	3
e f e e f e	BRBRPBR	-	-	-	-	-	-	1
e f e e f e	BRRLRBB	-	-	-	-	-	-	4
e f e e f e	BRRLRBR	-	-	-	-	-	-	3
e f e e f e	RLLBRBB	-	-	-	-	-	1	5
e f e e f e	RLLBRBR	-	-	-	-	-	-	4
e f e e f e	BBLRPBB	-	-	-	-	-	1	2
e f e e f e	BBLRLRL	-	-	-	-	-	1	2
e f e e f e	RLLBRRL	-	-	-	-	-	-	2
e f e e f e	LBLRBRBR	-	-	-	-	-	-	1
e f e e f e	BBLRLBR	-	-	-	-	-	1	1

Tablo 36'nin Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e e f f e e	BBBLLBB	-	-	-	-	-	-	4
e e f f e e	BBBLLBR	-	-	-	-	-	-	1
e e f f e e	BBRRBBB	-	-	-	-	-	-	3
e e f f e e	BBRRBBR	-	-	-	-	-	-	2
e e f f e e	BBRRBRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f f e e	BBRBLBB	-	-	-	-	-	-	3
e e f f e e	BBRBPRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f f e e	BBRBPLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f f e e	BBRRRBB	-	-	-	-	-	1	1
e e f f e e	BBRRRBR	-	-	-	-	-	-	2
e e f f e e	BBRRRLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f f e e	BBRBBBR	-	-	-	-	-	-	1
e e f f e e	LBRRBRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f f e e	LBRRBLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f f e e	LBRDLBB	-	-	-	-	-	1	2
e e f f e e	LBRDLBR	-	-	-	-	-	-	2
e e f f e e	LBRDLRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f f e e	LB RBPLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f f e e	LBRRBBB	-	-	-	-	-	-	3
e e f f e e	LBRRBBR	-	-	-	-	-	-	2
e e f f e e	BBRRBRL	-	-	-	-	-	-	1
e f e f e e	BRBRBBR	-	-	-	-	-	-	2
e f e f e e	BBLRBBB	-	-	-	-	-	1	2
e f e f e e	BBLRBBR	-	-	-	-	-	1	1
e f e f e e	BBLRRLB	-	-	-	-	-	-	1
e f e f e e	LBLBLBR	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 36'nın Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
efefee	<i>BBLRBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
efefee	<i>RLLBPLB</i>	-	-	-	-	-	-	2
efefee	<i>RLLBLRL</i>	-	-	-	-	-	-	2
efefee	<i>BRLLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	6
efefee	<i>BRLLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	4
efefee	<i>BRLLPLB</i>	-	-	-	-	-	-	2
efefee	<i>RLLBLBR</i>	-	-	-	-	-	-	4
efefee	<i>RLLBLBB</i>	-	-	-	-	-	-	6
effeee	<i>BRRLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeee	<i>BRRLBBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
effeee	<i>BRRLBBB</i>	-	-	-	-	-	1	1
effeee	<i>BRRLBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effeee	<i>BRRLBRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefff	<i>BBBBPBL</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeefff	<i>BBBBPRR</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeefff	<i>BBBRRRR</i>	-	-	-	-	-	1	2
eeefff	<i>BBBRRBL</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeefff	<i>BBBRRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefff	<i>BBBBPRB</i>	-	-	-	-	-	1	2
eeefff	<i>BBRLPBL</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeefff	<i>BBRLPRB</i>	-	-	-	-	-	2	-
eeefff	<i>BBRLPRR</i>	-	-	-	-	-	-	3
eeefff	<i>LBBBBPBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefff	<i>LBBBBPRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefff	<i>BBBLRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeefff	<i>BBBLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 36'nın Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e e f e f f	<i>BBBLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBBLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBRRPRB</i>	-	-	-	-	-	2	-
e e f e f f	<i>BBRRPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>LBRBRBB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>LBRBRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBRBRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBRBRRB</i>	-	-	-	-	-	1	-
e e f e f f	<i>BBRBRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e e f e f f	<i>BBRRPBL</i>	-	-	-	-	-	2	1
e e f e f f	<i>BBRRPRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e f f e	<i>BRBRRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e f f e	<i>RLLBPBR</i>	-	-	-	-	-	-	4
e f e f f e	<i>RLLBPBB</i>	-	-	-	-	-	-	6
e f e f f e	<i>BBLRRBB</i>	-	-	-	-	-	2	1
e f e f f e	<i>RLLBPRL</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e f f e	<i>BBLRRBR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e f f e	<i>LBLBPBR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e f f e	<i>BBLRRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e f f e	<i>BRRLPBB</i>	-	-	-	-	-	2	4
e f e f f e	<i>BBLRBLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e f f e	<i>BRRLPBR</i>	-	-	-	-	-	1	3
e f e f f e	<i>BRRLPRL</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e f f e	<i>BRRLLLB</i>	-	-	-	-	-	-	2
e e f f f e	<i>BBRRBLB</i>	-	-	-	-	-	-	2
e e f f f e	<i>LBRBPBB</i>	-	-	-	-	-	-	3

Tablo 36'nın Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e e f f f e	BBBLPBB	-	-	-	-	-	-	4
e e f f f e	LBRBPBR	-	-	-	-	-	-	2
e e f f f e	BBBLPBL	-	-	-	-	-	-	1
e e f f f e	BBRRRBB	-	-	-	-	-	-	2
e e f f f e	BBRRRBR	-	-	-	-	-	-	2
e e f f f e	BBRRRRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f f f e	BBRRPBB	-	-	-	-	-	-	1
e e f f f e	BBRRPBR	-	-	-	-	-	1	1
e e f f f e	BBRRRBB	-	-	-	-	-	1	1
e e f f f e	BBRRRBR	-	-	-	-	-	-	2
e e f f f e	BBRRRRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f f f e	BBRLLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f f f e	BBRLLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f f f e	LBRBPRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f f f e	LBRLLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f f f e	LBRRRBB	-	-	-	-	-	-	3
e e f f f e	LBRRRBR	-	-	-	-	-	-	2
e e f f f e	LBRRPBR	-	-	-	-	-	1	1
e e f f f e	LBRRRRL	-	-	-	-	-	-	1
e e f f f e	LBRRBLB	-	-	-	-	-	-	1
e e f f f e	BBRBPBB	-	-	-	-	-	-	3
e e f f f e	BBRBLBR	-	-	-	-	-	1	1
e e f f f e	BBRBPBR	-	-	-	-	-	-	2
e f f f e e	BRLLBB	-	-	-	-	-	-	3
e f f f e e	BBRRRBB	-	-	-	-	-	-	2
e e f f f e	BBRRRBB	-	-	-	-	-	-	2
e e f f f e	BBRRRBB	-	-	-	-	-	-	2
e f f f e e	BRRBLBB	-	-	-	-	-	-	2

Tablo 36'nın Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
effee	<i>BRRLBR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effee	<i>BRRLPLB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRRLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	3
effefe	<i>BRRLRBB</i>	-	-	-	-	-	-	2
effefe	<i>BRRLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRRLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRRLLLB</i>	-	-	-	-	-	-	2
effefe	<i>BRRLRRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRRLRRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
effefe	<i>BRRLPRL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>BBLLBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>BBLLLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>BBLLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>BBRLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>BBRLRBR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>LBRLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>LBRLLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>LBRLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>LBRLLRB</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeffef	<i>LBRLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>LBRLPBL</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeffef	<i>BBRLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>BBRLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>BBRLBBL</i>	-	-	-	-	-	-	2
eeffef	<i>BBRLRBR</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeffef	<i>BBRLBLB</i>	-	-	-	-	-	1	-
eeffef	<i>BBRLLRB</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>BBRLRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
eeffef	<i>BBRLRBR</i>	-	-	-	-	-	1	-

Tablo 36'nun Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
effffe	BRRLLLB	-	-	-	-	-	-	1
effffe	BRBLPBB	-	-	-	-	-	-	1
effffe	BRBPBB	-	-	-	-	-	-	3
effffe	BRBPBR	-	-	-	-	-	1	1
eeffff	BBRPRL	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	BBLPBL	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	BBLPBR	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	BBLPBR	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	BBRRRBL	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	BBRRRB	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	BBRRRR	-	-	-	-	-	-	2
eeffff	LBRBPBL	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	LBRBPRB	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	LBRBPRR	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	LBRRRBL	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	LBRRRRB	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	LBRRRRR	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	LBRBRBL	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	BBRRRBL	-	-	-	-	-	-	2
eeffff	BBRRRR	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	BBRRRB	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	BBRPBL	-	-	-	-	-	-	1
eeffff	BBRBPRB	-	-	-	-	-	1	-
efeef	BBLRLRR	-	-	-	-	-	-	1
efeef	BBLRLRB	1	-	-	-	-	-	-
efeef	BBLRLBL	-	-	-	-	-	-	1
efeef	RLLBBBL	-	-	-	-	-	-	2
efeef	RLLBBRB	-	-	-	-	-	-	2
efeef	RLLBBRR	-	-	-	-	-	-	2
effeff	BRBRBL	-	-	-	-	-	-	1

Tablo 36'nın Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
effeff	BRRBRRB	-	-	-	-	-	-	1
effeff	BRRBRRR	-	-	-	-	-	-	1
effeff	BRRLRRB	-	-	-	-	-	-	2
effeef	BRRBBBL	-	-	-	-	-	-	1
effeef	BRRBBRB	-	-	-	-	-	-	1
effeef	BRRBBRR	-	-	-	-	-	-	1
efffef	BRRBLBL	-	-	-	-	-	-	1
efffef	BRRBLRR	-	-	-	-	-	-	1
efffef	BRRBLRB	-	-	-	-	-	1	-
efffef	BRLLRRB	-	-	-	-	-	-	2
efffff	BRRBPBL	-	-	-	-	-	-	1
efffff	BRRBPRB	-	-	-	-	-	-	1
efffff	BRRLPRB	-	-	-	-	-	-	2
efeeff	RLLBRBL	-	-	-	-	-	-	2
efeeff	RLLBRRB	-	-	-	-	-	-	2
efeeff	RLLBRRR	-	-	-	-	-	-	2
efeeff	BBLRPBL	-	-	-	-	-	-	1
efeeff	BBLRPRB	-	-	-	-	-	1	-
efeeff	BRRRLRB	-	-	-	-	-	-	2
efefef	BRLLLBL	-	-	-	-	-	-	2
efefef	RLLBLBL	-	-	-	-	-	-	2
efefef	RLLBLRB	-	-	-	-	-	-	2
efefef	RLLBLRR	-	-	-	-	-	-	2
efefef	BBLRBBL	-	-	-	-	-	-	1
efefef	BBLRPRB	-	-	-	-	-	-	1
efefef	BBLRBRR	-	-	-	-	-	-	1
efffff	RLLBPBL	-	-	-	-	-	-	2
efffff	RLLBPRB	-	-	-	-	-	-	2
efffff	RLLBPRR	-	-	-	-	-	-	2

Tablo 36'nın Devamı

Şekil	Biçim	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10	> 10
e f e f f f	<i>BBLRRBL</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e f f f	<i>BBLRRRB</i>	-	-	-	-	-	1	-
e f e f f f	<i>BBLRRRR</i>	-	-	-	-	-	-	1
e f e f f f	<i>LBBBPRR</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e f f f	<i>BRRLPBL</i>	-	-	-	-	-	-	2
e f e f f f	<i>BRRLPRR</i>	-	-	-	-	-	-	2

Tablo 37. *Glu - Trp - Leu - Lys - Gly - Arg - Phe - NH₂* Nöropeptidinin Düşük Enerjili Konformasyonlarının Enerji Parametreleri (kcal/mol).

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
eeeeee	<i>B₁₃B₂₂B₃₂B₁₃BB₃₃B₁₂</i>	-38.20	3.41	13.07	10.65
eeeeee	<i>B₃₃B₃₂B₃₂R₃₂LB₂₃B₃₂</i>	-39.30	2.13	12.78	7.97
eeeeee	<i>B₃₂B₃₂B₃₂R₃₃LB₂₃B₃₂</i>	-40.67	1.87	12.42	5.99
eeeeef	<i>B₃₃B₂₂B₃₂B₂₃BR₃₂R₃₂</i>	-32.12	3.03	5.75	8.99
eeeeef	<i>B₂₃B₃₂R₃₂L₃₃BR₃₃B₂₂</i>	-40.48	0.67	13.59	6.14
eeeeef	<i>B₃₃B₂₂B₃₁R₃₃LR₃₃B₂₂</i>	-37.31	1.34	6.68	3.08
eeeeef	<i>B₃₂B₃₃R₃₂L₃₃BR₃₃B₂₂</i>	-33.82	0.98	7.13	6.66
eeeeef	<i>B₃₃B₃₂B₃₂B₂₃BR₃₃B₂₂</i>	-31.88	1.50	6.29	8.26
eeefef	<i>B₃₃B₃₂B₃₂B₂₃RB₃₃R₃₂</i>	-31.50	2.21	5.81	8.88
eeefef	<i>B₂₃B₃₂R₃₂L₃₃RB₃₃R₃₂</i>	-39.48	1.95	12.34	7.17
eeefef	<i>L₃₃B₃₂B₃₂R₂₃PB₃₃B₁₂</i>	-31.40	2.59	8.65	12.20
eeefee	<i>B₁₃B₂₂B₃₂B₁₃LB₃₃B₁₂</i>	-30.67	1.50	8.48	11.68
eeefee	<i>B₃₃B₂₂B₃₁R₃₃BR₂₃R₃₂</i>	-28.98	3.21	4.87	11.46
eeefee	<i>B₃₃B₃₂R₃₂R₃₃LB₃₃B₁₂</i>	-28.22	1.72	5.25	11.11
eeefee	<i>B₃₁B₃₃R₃₂B₁₃BB₃₃B₁₂</i>	-32.69	1.54	9.42	10.64
efeeee	<i>R₃₃L₃₂L₃₁B₁₃BB₃₃B₁₂</i>	-36.86	2.82	9.92	8.24
eeefff	<i>B₁₃B₂₂B₃₂B₁₃RB₂₃L₃₂</i>	-35.41	1.81	12.40	11.17
eeefff	<i>B₃₃B₃₂B₃₂R₃₂PR₃₂B₂₂</i>	-34.31	1.43	11.32	10.81
eeefff	<i>B₃₃B₂₂B₃₁R₃₃PR₃₃B₂₂</i>	-32.34	1.13	4.83	5.98
eeefff	<i>B₃₂B₃₂R₃₂L₃₃RR₃₂R₃₂</i>	-34.82	1.93	10.14	9.61
eeefff	<i>B₃₃B₃₃B₃₂B₂₃RR₃₃B₂₂</i>	-31.59	1.86	7.95	10.58
eeefef	<i>B₃₃B₃₂B₃₂R₃₂BR₃₃B₂₂</i>	-35.66	3.64	9.66	10.00
eeefef	<i>B₃₃B₂₃B₃₂B₂₃LR₃₃B₂₂</i>	-32.00	1.24	6.54	8.13
eeefef	<i>B₃₂B₃₂R₃₂L₃₃LR₃₁B₃₂</i>	-36.22	3.88	9.39	9.41
eeefef	<i>B₃₃B₃₂B₃₂L₃₃BR₃₃B₂₂</i>	-32.93	1.83	8.26	9.51

Tablo 37'nin Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
e f e e e f	$B_{32}B_{32}L_{32}R_{32}LR_{33}B_{22}$	-43.88	1.48	10.05	0.00
e f e e e f	$R_{33}L_{32}L_{32}B_{13}BR_{33}L_{22}$	-33.49	2.70	9.11	10.68
e e e f f e	$B_{33}B_{22}B_{31}R_{33}RB_{33}B_{12}$	-27.06	1.27	3.79	10.35
e e e f f e	$B_{33}B_{22}B_{32}B_{23}PB_{33}R_{32}$	-31.69	2.36	7.05	10.07
e e e f f e	$B_{13}B_{22}B_{32}B_{13}PB_{33}B_{12}$	-31.79	2.11	8.17	10.84
e e f e f e	$B_{33}B_{32}R_{32}R_{33}PB_{33}B_{23}$	-33.44	2.13	6.06	7.11
e e f e f e	$B_{32}B_{32}R_{32}R_{32}PB_{33}R_{32}$	-33.22	1.62	5.76	6.52
e e f e f e	$L_{33}B_{32}R_{32}R_{33}PB_{33}R_{33}$	-32.79	2.21	6.08	7.86
e f e e f e	$R_{33}L_{32}L_{31}B_{13}RB_{33}B_{12}$	-32.06	2.04	6.91	9.26
e e f f e e	$B_{32}B_{33}R_{32}B_{13}LB_{33}B_{12}$	-36.66	2.48	11.88	10.06
e f f e e e	$B_{33}R_{32}R_{32}B_{23}BB_{23}R_{32}$	-39.42	5.62	10.10	8.65
e e e f f f	$B_{32}B_{32}B_{32}R_{33}RR_{33}R_{32}$	-33.54	1.46	8.60	8.89
e e e f f f	$B_{33}B_{32}B_{32}B_{23}PR_{33}B_{22}$	-31.68	2.77	6.63	10.08
e e e f f f	$B_{33}B_{32}B_{32}L_{33}RR_{32}R_{32}$	-28.24	1.81	7.29	13.22
e e f e f f	$B_{31}B_{33}R_{32}B_{13}RR_{33}B_{22}$	-34.83	1.29	9.75	9.56
e f e e f f	$B_{32}B_{32}L_{32}R_{33}PR_{33}B_{22}$	-38.47	1.77	9.57	5.22
e e f f e f	$B_{32}B_{32}R_{32}R_{32}BR_{33}B_{22}$	-33.78	2.00	7.13	7.71
e e f f e f	$B_{32}B_{32}R_{32}B_{33}LR_{33}B_{22}$	-35.72	1.84	8.43	6.91
e f e f e f	$B_{32}B_{32}L_{32}R_{33}BR_{33}B_{22}$	-32.86	4.47	7.04	11.02
e f e f e f	$R_{33}L_{32}L_{31}B_{13}LR_{33}B_{22}$	-34.63	2.64	9.94	10.30
e e f f f e	$B_{33}B_{32}B_{32}L_{33}PB_{33}B_{12}$	-28.37	1.80	6.31	12.10
e e f f f e	$B_{32}B_{32}R_{32}R_{32}RB_{31}B_{32}$	-30.83	1.19	6.93	9.66
e f e f f e	$B_{32}B_{32}L_{32}R_{33}RB_{33}B_{12}$	-37.62	2.00	8.08	4.82
e e f f f e	$B_{32}R_{32}R_{32}L_{13}PB_{33}R_{32}$	-38.55	3.22	10.64	7.68
e e f f f f	$B_{31}B_{33}R_{32}B_{13}PR_{33}B_{22}$	-33.23	2.35	7.81	9.29

Tablo 37'nin Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağıl E.
e f f e f f	$B_{33}R_{32}R_{32}B_{23}RR_{32}R_{32}$	-33.68	3.21	8.49	10.38
e f e f f f	$B_{33}R_{32}R_{32}L_{13}PR_{31}B_{32}$	-37.29	2.65	12.38	10.11
e f f f f e	$B_{33}R_{32}R_{32}B_{23}PB_{23}R_{32}$	-36.64	4.05	9.65	9.42
f f f f f f	$R_{33}R_{32}B_{32}L_{13}PR_{33}B_{22}$	-35.86	1.29	11.44	9.23
f f f f f e	$R_{33}R_{32}R_{32}R_{33}RB_{33}B_{12}$	-35.44	3.15	9.70	9.78
f f f f e f	$B_{33}R_{32}R_{32}B_{23}LR_{33}B_{22}$	-38.84	5.30	10.36	9.11
f f f e f f	$R_{33}R_{32}R_{32}B_{33}RR_{32}B_{22}$	-37.29	2.71	11.04	8.82
f f f e f f	$R_{33}R_{32}R_{32}R_{33}PR_{33}B_{22}$	-34.74	2.13	8.09	7.84
f f e f f f	$R_{33}R_{32}B_{31}B_{13}PR_{33}B_{22}$	-35.28	2.41	8.22	7.71
f f e f f f	$R_{33}L_{33}B_{31}R_{33}RR_{32}R_{23}$	-34.04	1.28	9.67	9.28
f e f f f f	$R_{33}B_{12}R_{12}B_{22}PR_{33}B_{22}$	-31.76	2.14	8.11	10.85
f f f f e e	$R_{33}R_{32}R_{32}B_{33}LB_{23}L_{32}$	-33.73	3.41	8.27	10.32
f f e f f e	$R_{33}R_{32}B_{31}R_{13}RB_{33}B_{12}$	-30.51	2.14	6.23	10.22
f e f f f e	$R_{33}B_{33}R_{32}B_{23}PB_{33}B_{12}$	-36.30	3.38	7.44	6.88
f e f f f e	$R_{33}B_{33}R_{32}R_{33}RB_{23}B_{22}$	-32.97	2.33	8.21	9.92
f e f f f e	$L_{33}L_{32}R_{32}R_{33}RB_{23}R_{32}$	-31.97	2.35	7.48	10.22
f f f e e f	$R_{33}R_{32}R_{32}R_{33}PB_{23}B_{32}$	-32.09	4.12	7.28	11.67
f f f e e f	$R_{33}R_{32}R_{32}R_{33}LR_{33}B_{22}$	-32.53	2.71	8.35	10.89
f f e e f f	$R_{33}R_{32}B_{31}R_{13}PR_{32}B_{22}$	-37.06	3.12	9.19	7.61
f f e e f f	$R_{33}B_{33}L_{32}B_{32}RR_{32}R_{32}$	-35.75	3.00	8.80	8.42
f f e e f f	$R_{33}B_{33}L_{32}R_{33}PR_{33}B_{22}$	-38.68	1.63	9.30	4.60
f f e e f f	$R_{33}R_{32}B_{31}B_{13}RR_{32}R_{32}$	-35.17	1.44	10.16	8.79
f e e f f f	$B_{33}L_{32}B_{32}B_{13}PR_{33}B_{22}$	-35.80	2.42	8.86	7.84
f e e f f f	$L_{33}L_{32}R_{32}L_{33}PR_{33}B_{22}$	-35.99	1.85	10.68	8.90
f e f e f f	$R_{33}B_{33}R_{32}B_{23}RR_{33}B_{22}$	-35.53	2.69	9.02	8.54
f e f e f f	$B_{33}L_{32}R_{32}B_{33}RR_{32}B_{22}$	-33.03	1.44	9.22	9.99
f e f e f f	$L_{33}B_{32}R_{32}B_{33}RR_{33}B_{22}$	-32.02	1.75	9.62	10.72
f e f e f f	$R_{33}B_{32}R_{32}L_{13}RR_{33}B_{22}$	-36.70	1.21	12.58	9.45

Tablo 37'nin Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
f e f f e f	$R_{33}B_{33}R_{32}B_{23}LR_{33}B_{22}$	-37.55	3.30	10.55	8.66
f e f f e f	$L_{33}B_{32}R_{32}B_{33}LR_{33}B_{22}$	-34.43	2.50	8.53	8.96
f e f f e f	$L_{33}L_{32}R_{32}B_{32}LR_{23}B_{22}$	-35.11	2.42	8.93	8.60
f e f f e f	$R_{33}B_{33}R_{32}R_{33}BR_{33}B_{22}$	-33.02	4.02	5.73	9.09
f f e f e f	$R_{33}R_{32}B_{31}R_{13}BR_{33}R_{22}$	-30.95	2.95	6.45	10.77
f f e f e f	$R_{33}R_{32}R_{32}L_{33}LR_{33}B_{33}$	-41.38	5.79	12.38	9.15
f f e f e f	$R_{33}R_{32}R_{32}L_{33}PR_{33}B_{22}$	-37.56	3.51	10.38	8.69
f f e f e e	$R_{33}B_{33}L_{32}B_{32}LB_{33}B_{12}$	-28.11	2.91	8.11	15.27
f f e f e e	$R_{31}R_{31}B_{12}B_{23}LB_{23}B_{32}$	-37.77	3.43	11.82	9.83
f f e e f e	$L_{33}L_{33}B_{32}B_{23}RB_{33}R_{32}$	-33.19	2.31	6.01	7.50
f f e e e f	$B_{33}L_{32}B_{32}B_{13}RB_{31}B_{32}$	-38.32	2.20	8.07	4.31
f e f f e e	$L_{33}L_{32}R_{32}R_{33}BB_{33}B_{12}$	-33.93	1.64	9.03	9.10
f e f f e e	$B_{33}L_{32}R_{32}B_{33}LB_{23}B_{32}$	-33.14	1.10	7.95	8.28
f e f e e f	$R_{33}B_{33}R_{32}B_{23}BR_{33}B_{22}$	-34.09	3.34	5.99	7.60
f e f f e e	$L_{33}L_{32}R_{32}R_{33}BB_{33}B_{12}$	-33.93	1.64	9.03	9.10
f e f e e f	$B_{33}L_{32}R_{32}B_{33}BR_{33}B_{22}$	-29.87	1.80	6.66	10.96
f e f e e f	$R_{32}B_{32}R_{32}R_{33}LR_{33}B_{22}$	-30.39	1.99	7.17	11.13
f e f e e f	$R_{33}B_{33}R_{32}R_{33}LR_{33}B_{22}$	-32.09	2.07	7.50	9.85
f e f e f e	$B_{33}L_{32}B_{32}L_{33}RB_{33}R_{32}$	-31.44	1.86	7.32	10.09
f e f e f e	$L_{33}L_{32}R_{32}B_{32}RB_{23}R_{32}$	-30.56	2.20	6.85	10.85
f e f e f e	$R_{33}B_{33}R_{32}R_{33}PB_{33}R_{32}$	-36.23	2.26	7.21	5.59
f e f e f e	$L_{33}L_{32}R_{32}R_{33}PB_{33}R_{32}$	-33.27	1.97	6.48	7.53
f e e f e f	$L_{32}L_{32}R_{32}L_{33}LR_{33}B_{22}$	-38.59	4.13	11.03	9.93
f e e f e f	$L_{33}L_{33}B_{32}B_{23}LR_{33}B_{22}$	-30.07	1.31	9.30	12.89
f e e f e f	$B_{33}L_{32}B_{32}B_{13}LR_{33}B_{22}$	-40.19	3.55	10.16	5.88

Tablo 37'nin Devamı

Şekil	Biçim	EN	EE	ET	Bağlı E.
f e e f e f	$B_{33}L_{32}B_{31}R_{13}BR_{33}B_{22}$	-40.02	2.82	9.63	4.79
f e e f f e	$B_{33}L_{32}B_{31}R_{13}RB_{33}B_{12}$	-33.94	1.30	9.10	8.82
f e e f f e	$L_{33}L_{32}B_{32}B_{23}PB_{33}B_{12}$	-30.70	1.84	7.17	10.67
f e e f f e	$R_{33}B_{33}B_{32}R_{13}RB_{33}R_{32}$	-32.20	3.52	6.53	10.22
f e e f f e	$B_{33}L_{32}R_{32}L_{33}PB_{23}B_{32}$	-39.00	2.01	13.99	9.36
f e f e f e	$R_{32}B_{32}R_{32}R_{33}PB_{33}R_{32}$	-34.20	2.19	6.60	6.95
f e f e f e	$R_{33}B_{12}R_{12}B_{23}RR_{33}B_{12}$	-39.06	1.50	12.48	7.28
f e e e f f	$R_{33}L_{32}B_{31}R_{13}PR_{33}B_{22}$	-36.97	2.47	10.30	8.16
f e e f e e	$R_{33}B_{33}B_{32}B_{23}LB_{23}R_{32}$	-35.05	1.90	11.17	10.38
f e e f e e	$R_{33}B_{33}B_{32}R_{13}BB_{13}B_{32}$	-31.98	2.56	7.32	10.26
f e e f e e	$B_{33}L_{32}R_{32}L_{33}LB_{23}B_{32}$	-39.00	3.15	13.88	10.42
f e e e f e	$B_{33}L_{32}B_{32}B_{13}RB_{31}B_{32}$	-34.88	1.04	8.97	7.50
f e e e f e	$B_{33}L_{32}R_{32}L_{33}RB_{33}R_{32}$	-40.65	2.26	16.10	10.07
f e e e f e	$R_{33}B_{33}B_{32}B_{13}RB_{33}R_{32}$	-30.02	2.06	6.23	10.62
f e e e f e	$R_{33}B_{33}B_{32}R_{13}PB_{31}R_{32}$	-35.66	2.20	9.07	7.97
f e e e f e	$L_{33}L_{32}R_{32}L_{33}RB_{33}R_{32}$	-38.83	2.13	14.94	10.59
f e e e e f	$R_{33}B_{33}B_{32}B_{13}BR_{33}B_{22}$	-31.37	1.09	6.35	8.43
f e e e e f	$B_{33}L_{32}B_{32}B_{13}BR_{33}B_{22}$	-36.99	1.47	10.14	6.98
f f e e e e	$R_{31}R_{31}B_{12}B_{23}BB_{23}R_{32}$	-36.14	4.04	9.75	10.01
f f e e e e	$R_{33}R_{32}R_{32}L_{32}BB_{33}B_{12}$	-36.43	2.18	9.76	7.87
f f e e e e	$R_{33}R_{32}B_{31}R_{13}LB_{33}B_{12}$	-30.39	1.99	7.17	11.13
f e f e e e	$B_{33}L_{32}B_{32}L_{33}BB_{23}B_{32}$	-31.61	1.25	8.84	10.84
f e f e e e	$L_{33}L_{32}R_{32}B_{32}BB_{31}B_{32}$	-27.08	2.34	8.38	16.00
f e e e e e	$R_{33}B_{33}B_{32}B_{23}BB_{23}B_{32}$	-33.59	2.75	7.90	9.42
f e e e e e	$B_{33}L_{32}B_{31}B_{13}LB_{31}B_{32}$	-32.29	1.11	10.69	11.88
f e e e e e	$B_{33}L_{32}R_{32}L_{32}BB_{33}B_{12}$	-37.57	1.61	14.81	11.21
f e e e e e	$L_{33}L_{33}B_{31}R_{33}LB_{23}R_{32}$	-35.49	2.74	10.86	10.46
f e e e e e	$L_{33}L_{33}R_{32}L_{33}BB_{23}R_{32}$	-38.21	1.99	13.80	9.94
f e e e e e	$B_{33}L_{32}B_{32}B_{13}BB_{32}B_{12}$	-32.49	1.96	8.90	10.72

Tablo 38. $Glu^1Trp^2Leu^3Lys^4Gly^5Arg^6Phe^7NH_2$ molekülünün en düşük enerjili uzay yapısının mono-peptid içi ve mono-peptid arası karşılıklı etkileşme enerjilerinin değerleri $B_{332}B_{32}L_{3233}R_{33332}LR_{3333133}B_{22}$ (kcal/mol).

	Glu^1	Trp^2	Leu^3	Lys^4	Gly^5	Arg^6	Phe^7NH_2
Glu^1	-0.55	-2.92	-0.27	-1.24	-1.16	0.47	-5.91
Trp^2		-1.40	-4.41	-2.14	-1.64	-6.07	-0.76
Leu^3			0.19	-1.70	-1.25	-0.45	0.01
Lys^4				0.43	-1.89	0.67	-0.11
Gly^5					1.22	-0.71	-0.41
Arg^6						-3.94	-3.58
Phe^7NH_2							-2.90

Tablo 39. Hidrojen Bağı Oluşturan Atom Çiftlerinin Sayısı
 $B_{332}B_{32}L_{3233}R_{33332}LR_{3333133}B_{22}$.

Bag oluşturan atom grupları	Bag uzunluğu A°	Enerji kcal/mol
$NH(Glu^1)$, $CO(Lys^4)$	2.37	-0.50
$CO(Glu^1)$, $NH(Arg^6)$	2.22	-0.73
$CO(Glu^1)$, $NH(Phe^7)$	1.91	-1.39

4. SONUÇ VE TARTIŞMA

Teorik Konformasyon Analizin yardımıyla deniz yıldızının $Glu^1-Gly^2-Arg^3-Phe^4-NH_2$, $Glu^1-Leu^2-Leu^3-Gly^4-Gly^5-Arg^6-Phe^7-NH_2$ ve $Glu^1-Trp^2-Leu^3-Lys^4-Gly^5-Arg^6-Phe^7-NH_2$ noropeptidlerinin uzay yapısı detaylı incelendi. Kutupsal ortamda sağlanabilecek kararlı durumların geometrik ve enerjik parametreleri; tüm atomların kartezyen koordinatlarının, ikikat açılarının, çeşitli etkileşme enerjilerinin, değerleri bulunarak bunlar tablo şeklinde düzenlendi.

Moleküllerin uzay yapısının kararlaşmasında gayri-valent etkileşme enerjilerinin daha önemli rol oynadığı gözlenilmektedir. Hesaplama süresinde yapıların enerjik elenmesi bakımından da gayri-valent etkileşme enerjisinin ehemiyeti büyük olmuştur. Elektrostatik karşılıklı etkileşme ve hidrojen bağı enerjilerinin kararlaşmaya katkısının nisbeten küçük olması, incelenen moleküllerin uzay yapısının dış etkilere bağlılığının zayıf olmasını göstermektedir. Demek ki. adı geçen moleküllerin değişken fiziksel, kimyasal özelliklere sahip ortamlarda biyolojik özelliklerini ve aktifliğini koruyabilmesi sözkonusudur.

Konformasyonların bağıl enerjinin değerlerine göre dağılımı $Glu^1-Gly^2-Arg^3-Phe^4-NH_2$ molekülünün bükülmüş ve kısmen bükülmüş (fff , ffe , fef , ee) şekillerinin daha ihtimalli olması ve böyle şekillere karşılık gelen yapılarının kesin farklı geometrilere rağmen enerji parametrelerinin benzerliği, adı geçen molekülün mümkün çok fonksiyonluluğuna ve çeşitli reseptörlerle bağlanabilme imkanlarının büyüklüğüne işaret olabilir.

Diğer iki molekülün en düşük bağıl enerjiye sahip olan konformasyonları diğerlerinden oldukça büyük enerjiye sahiptir. Bu ise, bu moleküllerin tek bir yapısının daha büyük ihtimale sahip olduğunu göstermektedir. Buna istinaden $Glu^1-Leu^2-Leu^3-Gly^4-Gly^5-Arg^6-Phe^7-NH_2$ ve $Glu^1-Trp^2-Leu^3-Lys^4-Gly^5-Arg^6-Phe^7-NH_2$ moleküllerinin $Glu^1-Gly^2-Arg^3-Phe^4-NH_2$ molekülünün aksine tek fonksiyonlu moleküller olduklarını söyleyebiliriz.

5 EKLER

EK 1.

Tablo E1. Antho-RFamid Molekülünün En düşük Enerjili Konformasyonunda Atomların Koordinatları.

1	GLU			
1	H	.0000	.0000	.0000
2	N	.0000	1.0000	.0000
3	H	-.4713	1.3338	.8164
4	CA	1.2429	1.7468	.0000
5	HA	1.8873	1.3701	-.6654
6	CR	1.0281	3.1688	-.5221
7	HB	.5352	3.1368	-1.4938
8	HB	.3511	3.7088	.1399
9	CG	2.3573	3.9182	-.6347
10	HG	2.1755	4.9566	-.9117
11	HG	2.8494	3.9489	.3374
12	CD	3.2748	3.2556	-1.6643
13	OE1	3.1066	3.3949	-2.8646
14	OE2	4.2183	2.5562	-1.3342
15	C	1.8517	1.7643	1.4036
16	O	1.1307	1.8583	2.3956
2	GLY			
17	N	3.1679	1.6724	1.4419
18	H	2.5894	1.9413	2.2120
19	CA	4.5240	1.2998	1.7949
20	HA	4.5178	.7674	2.6414
21	HA	4.9544	.8263	1.8264
22	C	5.3787	2.5384	2.0712
23	O	5.6353	2.8749	3.2261
3	ARG			
24	N	5.7944	3.1806	.9954
25	H	5.5995	2.8880	.0593
26	CA	6.5857	4.3905	1.1071
27	HA	6.9675	4.4854	2.0265
28	CB	7.7840	4.3516	.1566
29	HB	8.4158	3.4965	.3966
30	HB	7.4344	4.3607	-.8758
31	CG	8.6591	5.5951	.3264
32	HG	8.1027	6.4807	.0194
33	HG	9.0332	5.6487	1.3487
34	CD	9.8915	5.5258	-.5776
35	HD	9.5798	5.4806	-1.6211
36	HD	10.5017	4.6657	-.3017
37	NE	10.7165	6.7421	-.4029
38	HE	10.3971	7.4331	.2456
39	CQ	11.8618	6.9714	-1.0596
40	NZ1	12.3251	6.0680	-1.9341
41	HZ1	13.1780	6.2407	-2.4268
42	HZ1	11.8180	5.2211	-2.0940
43	NZ2	12.5437	8.1042	-.8419
44	HZ2	13.4003	8.2737	-1.3292
45	HZ2	12.1959	8.7801	-.1921
46	C	5.7262	5.6153	.7876
47	O	5.0774	5.6675	-.2561

4	FHE			
48	N	5.7494	6.5670	1.7020
49	H	6.3293	6.5460	2.5164
50	CA	4.9079	7.7414	1.5790
51	HA	4.8884	8.0502	.6281
52	CB	3.4563	7.3011	1.9013
53	HB	2.8391	8.2782	1.8519
54	HB	3.0649	6.7209	1.1273
55	CG	3.2945	6.7200	3.2716
56	CD1	3.4343	5.3731	3.3976
57	HD1	3.6617	4.7646	2.5223
58	CE1	3.2841	4.7596	4.6694
59	HE1	3.3963	3.6801	4.7704
60	CQ	3.0004	5.5189	5.7614
61	HQ	2.8851	5.0480	6.7376
62	CE2	2.8605	6.8658	5.6354
63	HE2	2.6331	7.4744	6.5106
64	CD2	3.0107	7.4793	4.3636
65	HD2	2.8986	8.5588	4.2626
66	C	5.4162	8.8486	2.5046
67	O	6.2092	8.5912	3.4090
68	N	4.9406	10.0528	2.2474
69	H	5.2178	10.8308	2.8113
70	H	4.3032	10.1871	1.4888

Tablo E3. Pol-RFamid I Molekülünün En Düşük Enerjili Konformasyonunda Atomların Koordinatları.

1	GLU	.0000	.0000	.0000
1	H	.0000	1.0000	.0000
2	N	-.4713	1.3338	.8164
3	H	1.2429	1.7460	.0000
4	CA	1.8700	1.3989	-.6969
5	HA	1.0157	3.1895	-.4558
6	CB	.5447	3.1983	-1.4388
7	HB	.3154	3.6851	.2165
8	HB	2.3342	3.9644	-.5010
9	CG	2.7679	4.0172	.4976
10	HG	3.0585	3.4286	-1.1145
11	HG	2.1225	5.3751	-1.0543
12	CD	2.3428	5.6514	-2.2220
13	OE1	1.7233	6.2909	-.3541
14	OE2	1.8872	1.7052	1.3871
15	C	1.2065	1.8775	2.3970
16	O			
2	LEU	3.1872	1.4763	1.3917
17	N	2.5976	1.3723	2.1927
18	H	4.6003	1.6163	1.6850
19	CA	5.1105	1.8357	.8535
20	HA	4.8601	2.9058	2.4664
21	CB	4.1604	2.9738	3.2994
22	HB	4.5725	3.7637	1.8587
23	HB	6.2872	3.1016	2.9820
24	CG	6.5560	2.3210	3.6937
25	HG	6.3749	4.3195	3.9040
26	CD1	7.3124	4.4190	4.2373
27	HD1	7.3124	4.4190	4.2373
28	HD1	5.7570	4.1955	4.6804
29	HD1	7.2821	3.1876	1.8228
30	CD1	8.2812	3.3791	2.2142
31	HD1	7.2822	2.2465	1.2729
32	HD1	6.9927	3.9984	1.1543
33	HD1	5.0940	.3548	2.3961
34	C	4.4364	-.1465	3.3067
35	O			
3	LEU	6.2438	-.1205	1.9550
36	N	5.6004	-.6355	2.5214
37	H	7.5944	-.6474	1.9281
38	CA	8.1419	-.1726	1.2392
39	HA	8.3635	-.2143	3.1779
40	CB	7.7685	-.4320	4.0619
41	HB	8.4253	-.8735	3.2013
42	HB	9.7631	-.8095	3.3450
43	CG	9.7158	-1.8921	3.4610
44	HG	10.3592	-.4381	4.7032
45	CD1	11.2662	-.8494	4.7936
46	HD1	11.2662	-.8494	4.7936
47	HD1	9.7653	-.7784	5.4323
48	HD1	10.6750	-.3975	2.1865
49	CD1	11.6826	-.7725	2.3658
50	HD1	10.2926	-.8158	1.2554
51	HD1	10.7003	.6897	2.1124
52	HD1	7.5390	-2.1639	1.7334
53	C	8.0113	-2.6811	.7222
54	O			

4	GLY			
55	N	6.9602	-2.8316	2.7140
56	H	7.5693	-3.2532	2.0422
57	CA	6.0610	-3.7489	3.3867
58	HA	6.4819	-4.6543	3.4412
59	HA	5.8001	-3.3736	4.2762
60	C	4.7633	-3.9238	2.5954
61	O	4.5720	-4.9380	1.9263
5	GLY			
62	N	3.9084	-2.9233	2.6977
63	H	4.0254	-2.1491	3.3197
64	CA	2.7063	-2.8825	1.8879
65	HA	2.4702	-3.8068	1.5881
66	HA	1.9744	-2.4258	2.3937
67	C	2.9291	-2.0608	.6166
68	O	2.2416	-1.0671	.3871
6	ARG			
69	N	3.8891	-2.5045	-.1732
70	H	4.4085	-3.3425	-.0057
71	CA	4.2633	-1.7811	-1.3729
72	HA	3.4615	-1.3748	-1.8111
73	CB	5.1969	-.6152	-1.0414
74	HB	4.7239	.0370	-.3073
75	HB	6.1664	-.9996	-.7243
76	CG	5.4585	.2465	-2.2783
77	HG	5.9732	-.3446	-3.0558
78	HG	4.5244	.6853	-2.6291
79	CD	6.3834	1.4186	-1.9443
80	HD	7.3413	1.0405	-1.5870
81	HD	5.9058	2.0655	-1.2084
82	NE	6.6384	2.2244	-3.1593
83	HE	6.1983	1.9373	-4.0101
84	CQ	7.4209	3.3118	-3.1867
85	NZ1	7.5980	3.9811	-4.3340
86	HZ1	8.1779	4.7955	-4.3533
87	HZ1	7.1501	3.6662	-5.1708
88	NZ2	8.0265	3.7298	-2.0668
89	HZ2	8.6135	4.5391	-2.0881
90	HZ2	7.8914	3.2325	-1.2098
91	C	4.9580	-2.7202	-2.3610
92	O	4.5236	-2.8563	-3.5037
7	FHE			
93	N	6.0217	-3.3414	-1.8866
94	H	6.3895	-3.1981	-.9678
95	CA	6.7475	-4.3023	-2.6942
96	HA	6.1375	-4.7061	-3.3760
97	CB	7.8273	-3.5898	-3.5111
98	HB	8.2721	-4.2915	-4.2166
99	HB	7.3671	-2.8171	-4.1269
100	CG	8.9231	-2.9700	-2.6416
101	CD1	8.7934	-1.6932	-2.1917
102	HD1	7.9087	-1.1114	-2.4504
103	CE1	9.8104	-1.1180	-1.3847
104	HE1	9.7065	-.0947	-1.0241
105	CQ	10.9142	-1.8440	-1.0618
106	HQ	11.6949	-1.4024	-.4424
107	CE2	11.0440	-3.1208	-1.5118
108	HE2	11.9286	-3.7026	-1.2530
109	CD2	10.0269	-3.6960	-2.3188
110	HD2	10.1309	-4.7193	-2.6794
111	C	7.3600	-5.3815	-1.7992
112	O	7.4372	-5.2142	-.5831
113	N	7.7785	-6.4609	-2.4335
114	H	8.1948	-7.2120	-1.9211
115	H	7.6791	-6.5275	-3.4263

Tablo E5. Pol-RFamid II Molekülünün En Düşük Enerjili Konformasyonunda

Atomların Koordinatları.

1	GLU			
1	H	.0000	.0000	.0000
2	N	.0000	1.0000	.0000
3	H	-.4713	1.3333	.8164
4	CA	1.2429	1.7463	.0000
5	HA	1.8716	1.3962	-.6941
6	CB	1.0167	3.1878	-.4620
7	HB	.5741	3.1929	-1.4580
8	HB	.2933	3.6772	.1901
9	CG	2.3295	3.9736	-.4693
10	HG	2.1396	5.0105	-.7467
11	HG	2.7492	4.0043	.5362
12	CD	3.3367	3.3496	-1.4373
13	OE1	3.0707	3.1581	-2.6124
14	OE2	4.4539	3.0138	-1.0302
15	C	1.8839	1.7106	1.3888
16	O	1.2358	2.0303	2.3840
2	TRP			
17	N	3.1445	1.3197	1.4113
18	H	2.5556	1.4196	2.2133
19	CA	4.5581	1.1805	1.7026
20	HA	5.0702	1.0438	.8546
21	CB	5.1044	2.4873	2.2811
22	HB	5.0076	3.2815	1.5408
23	HB	4.4840	2.8009	3.1207
24	CG	6.5626	2.3784	2.7313
25	CD1	7.6677	2.6290	2.0161
26	HD1	7.5685	2.9534	.9802
27	NE1	8.8104	2.4200	2.7610
28	HE1	8.8439	2.1201	3.7144
29	CE2	8.4023	2.0120	4.0256
30	CK2	9.2967	1.7066	5.0584
31	HK2	10.3758	1.7746	4.9203
32	CQ2	8.7319	1.3130	6.2659
33	HQ2	7.6492	1.2535	6.3770
34	CK3	7.3492	1.2428	6.3891
35	HK3	6.7985	1.4825	5.5895
36	CE3	6.4454	1.5457	5.3637
37	HE3	6.7691	1.8654	4.3732
38	CD2	7.0362	1.9428	4.1466
39	C	4.8070	.0218	2.6783
40	O	4.0976	-.1247	3.6644
3	LEU			
41	N	5.8132	-.7689	2.3468
42	H	6.4200	-.6115	1.5876
43	CA	6.1119	-1.9545	3.1263
44	HA	6.8620	-2.4679	2.7095
45	CD	6.7922	-1.5729	4.4426
46	HB	6.1021	-.9910	5.0535
47	HB	7.5849	-.8508	4.2465
48	CG	7.3517	-2.7324	5.2692
49	HG	6.5588	-3.4190	5.5658
50	CD1	7.7972	-2.2547	6.6527
51	HD1	8.1360	-3.0329	7.1815
52	HD1	8.1360	-3.0329	7.1815
53	HD1	7.0211	-1.8412	7.1290
54	CD1	8.4779	-3.4470	4.5195
55	HD1	8.9455	-4.1794	5.1775
56	HD1	8.0688	-3.9536	3.6453
57	HD1	9.2227	-2.7178	4.2008
58	C	4.8319	-2.7724	3.3087
59	O	4.4378	-3.0724	4.4346

4	LYS			
60	N	4.2203	-3.1087	2.1883
61	H	4.0691	-3.5798	3.0574
62	CA	3.1453	-3.2412	1.2243
63	HA	3.5034	-3.2813	.2915
64	CB	2.3770	-4.5473	1.4359
65	HB	3.0532	-5.3943	1.3202
66	HD	1.8685	-4.5224	2.3997
67	CG	1.2859	-4.7192	.3771
68	HG	.5330	-3.9100	.4955
69	HG	1.7371	-4.7440	-.6148
70	CD	.5571	-6.0530	.5525
71	HD	1.2554	-6.8760	.4007
72	HD	.0594	-6.0750	1.5220
73	CE	-.5412	-6.2201	-.4995
74	HE	-1.2875	-5.4348	-.3795
75	HE	-.1002	-6.2079	-1.4963
76	NE	-1.2280	-7.5201	-.3298
77	HE1	-1.6800	-7.5945	.5703
78	HE1	-1.1271	-8.1103	-1.1432
79	C	2.1793	-2.0609	1.3448
80	O	1.8805	-1.3952	.3546
5	GLY			
81	N	1.7193	-1.8385	2.5619
82	H	1.7288	-1.1323	1.8539
83	CA	.7225	-1.6536	3.5986
84	HA	-.1104	-1.2691	3.2006
85	HA	.5748	-2.5164	4.0819
86	C	1.2024	-.6486	4.6477
87	O	2.0371	-.9759	5.4898
6	ARG			
88	N	.6562	.5501	4.5628
89	H	.0430	.8343	3.8256
90	CA	.9197	1.5635	5.5658
91	HA	.9907	1.1565	6.4765
92	CB	2.2606	2.2540	5.3086
93	HB	3.0556	1.5093	5.2681
94	HB	2.1913	2.8685	4.4110
95	CG	2.6173	3.2031	6.4544
96	HG	1.8761	3.9999	6.5158
97	HG	2.7293	2.6403	7.3811
98	CD	3.9634	3.6854	6.2023
99	HD	3.9131	4.4690	5.2831
100	HD	4.7533	3.1355	6.1607
101	NE	4.2764	4.8131	7.3122
102	HE	3.6189	4.8811	8.0626
103	CQ	5.3844	5.5643	7.3710
104	NZ1	5.5862	6.3801	8.4147
105	HZ1	6.4155	6.9370	8.4610
106	HZ1	4.9074	6.4321	9.1472
107	NZ2	6.2907	5.4998	6.3860
108	HZ2	7.1158	6.0633	6.4281
109	HZ2	6.1419	4.8882	5.6090
110	C	-.1963	2.6101	5.5653
111	O	-.8265	2.8512	6.5937
7	PHE			
112	N	-.4059	3.2015	4.4040
113	H	.1347	3.0257	3.5813
114	CA	-1.4680	4.1754	4.2428
115	HA	-2.1954	4.0012	4.9066
116	CB	-.9525	5.5739	4.5880
117	HB	-1.7862	6.2760	4.6014
118	HB	-.5595	5.5762	5.6046
119	CG	.1228	6.0706	3.6195
120	CD1	1.4345	5.8129	3.8695
121	HD1	1.7198	5.2526	4.7599
122	CE1	2.4325	6.2739	2.9707
123	HE1	3.4839	6.0674	3.1711
124	CQ	2.0766	6.9730	1.8597
125	HQ	2.8427	7.3268	1.1698
126	CE2	.7649	7.2307	1.6097
127	HE2	.4796	7.7910	.7193
128	CD2	-.2331	6.7697	2.5086
129	HD2	-1.2845	6.9762	2.3082
130	C	-2.0087	4.1281	2.8123
131	O	-1.3810	3.5498	1.9265
132	N	-3.1633	4.7418	2.6317
133	H	-3.5833	4.7600	1.7244
134	H	-3.6180	5.1885	3.4022

EK 2.

Tablo E2. Antho-RFamid Molekülünün En Düşük Enerjili Konformasyonunda İki Kat Açı Değerleri.

ϕ_1	χ_{11}	χ_{12}	χ_{13}	ψ_1	ω_1	ϕ_2	ψ_2
-77.99	-175.170	63.75	-103.24	-142.27	166.48	102.63	-77.69
ω_2	ϕ_3	χ_{21}	χ_{22}	χ_{23}	χ_{24}	χ_{25}	χ_{26}
178.48	-104.76	-177.05	178.38	179.61	179.93	179.81	179.77
χ_{27}	ψ_3	ω_3	ϕ_4	χ_{31}	χ_{32}	ψ_4	ω_4
179.75	127.57	-175.46	-163.05	54.84	-87.110	164.32	179.51

Tablo E4. Pol-RFamid I Molekülünün En Düşük Enerjili Konformasyonunda İki Kat Açı Değerleri.

ϕ_1	χ_{11}	χ_{12}	χ_{13}	ψ_1	ω_1	ϕ_2	χ_{21}	
-75.16	-178.09	175.84	82.11	135.69	162.79	-118.37	173.25	
χ_{22}	χ_{23}	χ_{24}	ψ_2	ω_2	ϕ_3	χ_{31}	χ_{32}	
62.59	179.23	177.04	135.22	-163.93	-134.57	174.46	61.59	
χ_{33}	χ_{34}	ψ_3	ω_3	ϕ_4	ψ_4	ω_4	ϕ_5	
179.14	175.87	-63.84	-161.14	92.07	-76.79	173.05	-94.57	
ψ_5	ω_5	ϕ_6	χ_{41}	χ_{42}	χ_{43}	χ_{44}	χ_{45}	
59.48	-176.36	-157.87	-173.25	179.56	179.12	-179.45	-0.11	
χ_{46}	χ_{47}	ψ_6	ω_6	ϕ_7	χ_{51}	χ_{52}	ψ_7	ω_7
179.66	179.75	-56.44	177.49	-148.76	65.40	-89.85	165.27	179.76

Tablo E6. Pol-RFamid II Molekülünün En Düşük Enerjili Konformasyonunda İki Kat Açı Değerleri.

ϕ_1	χ_{11}	χ_{12}	χ_{13}	ψ_1	ω_1	ϕ_2	χ_{21}	χ_{22}
-75.42	-179.69	61.28	-124.90	127.67	-168.21	-125.16	174.82	90.93
ψ_2	ω_2	ϕ_3	χ_{31}	χ_{32}	χ_{33}	χ_{34}	ψ_3	ω_3
135.16	-176.12	50.39	-171.19	64.00	178.53	172.58	55.69	159.97
ϕ_4	χ_{41}	χ_{42}	χ_{43}	χ_{44}	χ_{45}	ψ_4	ω_4	ϕ_5
-86.39	-177.27	177.58	179.56	179.33	-118.52	-52.65	157.84	99.03
ψ_5	ω_5	ϕ_6	χ_{61}	χ_{62}	χ_{63}	χ_{64}	χ_{65}	χ_{66}
103.87	174.09	-157.87	-173.25	179.56	179.12	-179.45	-0.11	179.66
χ_{67}	ψ_6	ω_6	ϕ_7	χ_{71}	χ_{72}	ψ_7	ω_7	
179.75	-56.44	177.49	-148.76	65.40	-89.85	165.27	179.76	

EK 3

Tablo E7. *Glu*-Monopeptidinin Diktleri.

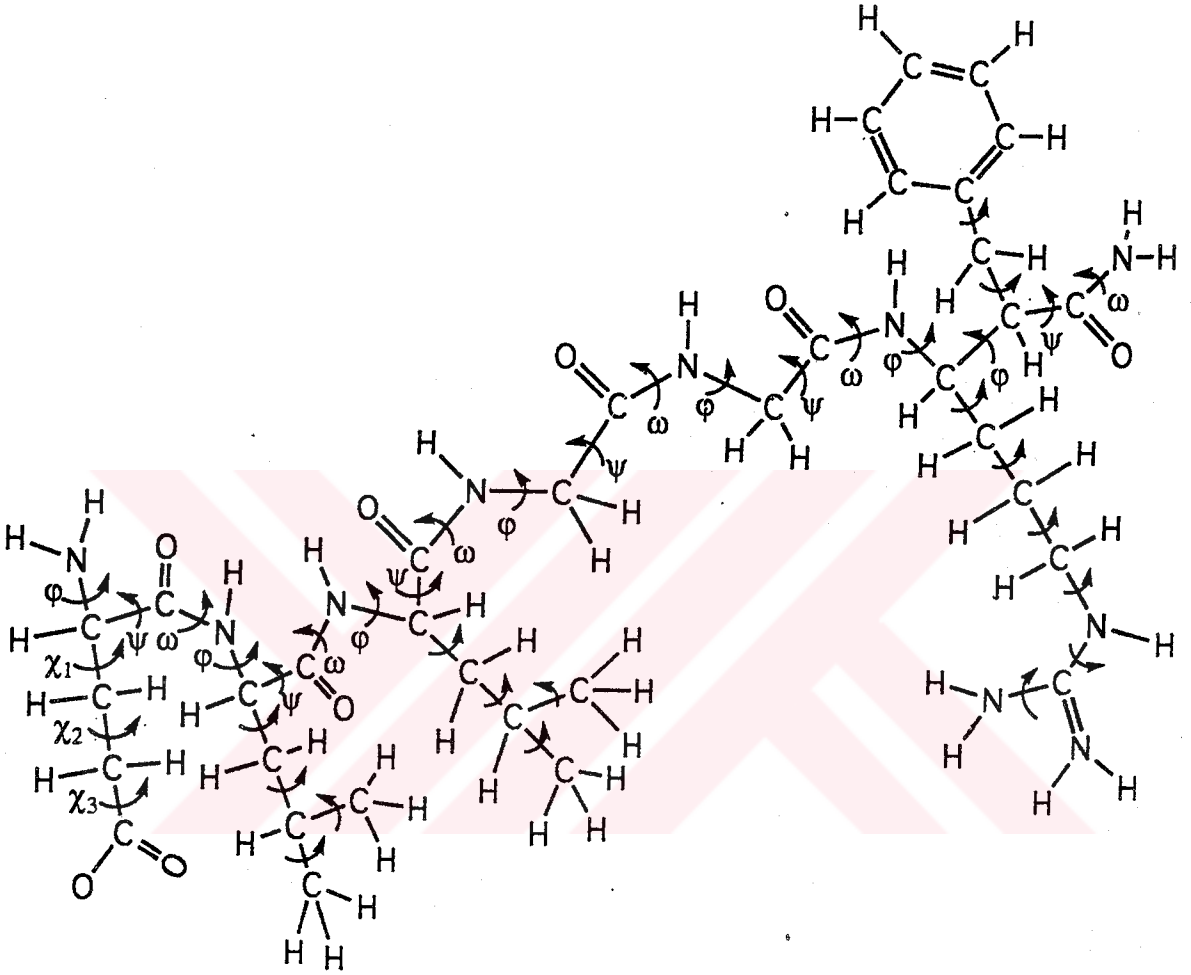
AS	ÇBS	HAB	HAG	BAGV	DS	AK	PBS	BU	VA	FA	EY	EE	SST	CST
H	1	0	2	0	0	1	0	1.00	90.0	0.0	0.2900	0.0	0.0	0.0
N	1	1	4	0	1	5	0	1.00	90.0	0.0	-0.1800	0.0	0.0	0.0
H	0	2	0	0	0	1	0	1.00	109.5	-120.0	0.2900	0.0	0.0	0.0
CA	2	2	6	15	1	4	0	1.45	121.0	0.0	0.0640	0.3	1.0	3.0
HA	0	4	0	0	0	3	0	1.00	111.0	123.45	0.2000	0.0	0.0	0.0
CB	1	4	9	0	1	14	0	1.53	111.0	-123.45	-0.0300	1.5	-1.0	3.0
HB	0	6	0	0	0	13	0	1.09	109.9	121.88	0.0200	0.0	0.0	0.0
CG	1	6	12	0	1	14	0	1.53	111.0	0.0	0.1100	1.5	-1.0	3.0
HG	0	9	0	0	0	13	0	1.09	109.9	121.88	0.0500	0.0	0.0	0.0
HG	0	9	0	0	0	13	0	1.09	109.9	-121.88	0.0500	0.0	0.0	0.0
CD	1	9	14	0	1	14	0	1.53	111.0	0.0	0.4700	0.0	-1.0	6.0
OE1	0	12	0	0	0	12	0	1.22	122.0	180.00	-0.0380	0.0	0.0	0.0
OE2	0	12	0	0	0	12	0	1.22	122.0	-180.00	-0.0380	0.0	0.0	0.0
C	1	4	17	0	1	4	0	1.53	110.3	0.0	0.4500	0.2	-1.0	2.0
O	1	15	0	0	0	2	0	1.23	120.5	180.00	-0.3800	0.0	0.0	0.0

Tablo E8. *Gly*-Monopeptidinin Diktleri.

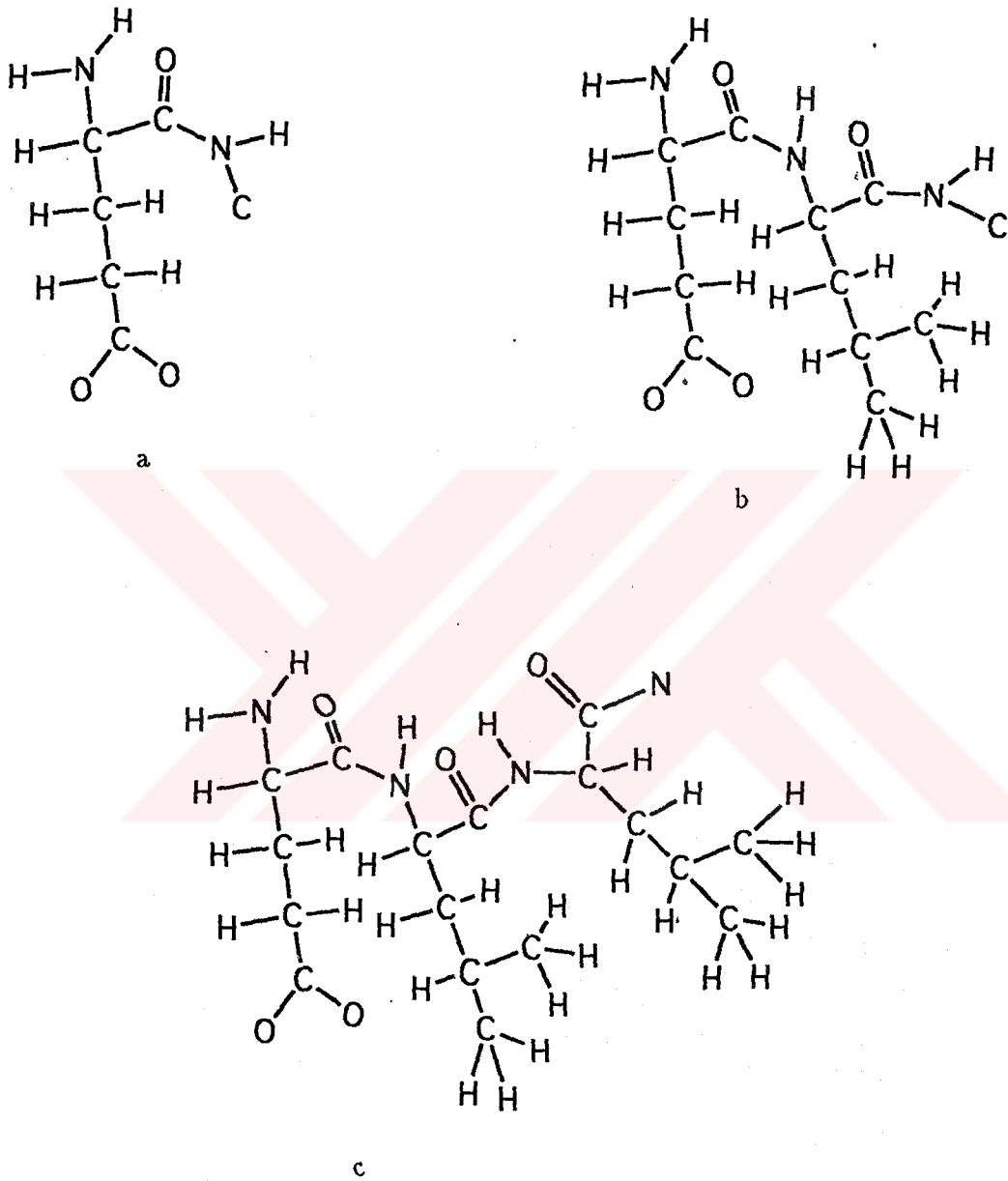
AS	ÇBS	HAB	HAG	BAGV	DS	AK	PBS	BU	VA	FA	EY	EE	SST	CST
N	1	-1	3	0	1	5	1	1.32	115.0	0.0	-0.3400	10.0	-1.0	2.0
H	0	1	0	0	0	1	0	1.00	124.0	180.00	0.1760	0.0	0.0	0.0
CA	1	1	6	0	1	4	0	1.45	121.0	0.0	-0.0080	0.3	1.0	3.0
HA	0	3	0	0	0	3	0	1.00	109.7	117.25	0.0550	0.0	0.0	0.0
HA	0	3	0	0	0	3	0	1.00	109.7	-117.25	0.0550	0.0	0.0	0.0
C	1	3	8	0	1	4	0	1.53	110.0	0.0	0.4500	0.1	-1.0	3.0
O	1	6	0	0	0	2	0	1.23	120.5	180.00	-0.3800	0.0	0.0	0.0

AA-Atomun Simgesi, ÇBS-Çıkan Bağ Sayısı, HAB-İlengi Atomdan Başlıyor, HAG-Hangi Atoma Gider, BAGV-Başka Atoma Giden Var mı?, DS-Dönme Sayısı, AK-Atomun Kodu, PBS- Peptid Bağların Sayısı, BU- Bağ uzunluğu, VA- Valens Bağı, FA- Faz Açısı, EY- Elektrik Yükü, EE- Engel Enerjisi, SST-sin simetri tipi, CST- cos Simetri Tipi

EK 4



Şekil E1. Pol-RFamid I Nöröpeptid Molekülü



Şekil E2. (a) *Glu*- mono-peptidi (b) *Glu* - *Leu* di-peptidi (c)
Glu - *Leu* - *Leu* tri-peptidi

6 KAYNAKLAR

- Akhmedov, N.A., Akhverdieva, C.A., Godjaev, N.M. and Popov, E.M., 1986, *Int. J. Peptide Protein. Res.*, 27, 95.
- Anfinsen, C.B., Haber, E., Sela, M., White, F. H., 1961, *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 47, 1309.
- Anfinsen, C.B., 1973, *Science.*, 181, 223.
- Birnstein, F. C., Koetzle, T. F., Williaams, G. J. B., et al., 1977, *Eur. J. Biochem.*, 80, (N2), 319.
- Blaut, E.R., de Love, C., Bloom, S.M., Fasman, G.D., 1960, *J. Amer. Chem. Soc.*, 82, 3787.
- Blaut, E.R., and Stahmann, M.A., 1962, *Univ. Wisconsin. Press Madison.*, 275
- Born, M., Oppenheimer, J., 1927, *Ann. Phys.*, 84, 457.
- Burkert, U., Ellinger, N., 1986, *Moleküler mekanik. (Rusça)*
- Cutty, B., Merryfield, R.B., 1969, *J. Amer. Chem. Soc.*, 91, 501.
- Goca, N. ve Şahin, Y., 1993, *Molekülün Yapısı 2. Cild. Atatürk Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Basımevi, Erzurum*, 214.
- Grimmelikhuijzen, C. J. P., Rinehart, K. L. and Spencer, A. N., 1992, *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, 183, 375.
- Hendrickson, W. A., Konnert, J. H., 1980, *Biomolecular Structure, Function, Conformation and Evolution. Oxford.*, 1, 43.
- Iliel, E., Ellinger, N., Enjial, S., Morrison, G., 1969, *Konformasyon Analiz. (Rusça)*
- Jones, T. A., 1982, *Computational Crystallography. Oxford.*, 303.
- Kitaygorodski, A. I., 1960, *Tetrahedron.*, 9, 183.
- Kitaygorodski, A. I., 1961, *Tetrahedron.*, 14, 230
- Klotz, T. M., Fransen, J. S., 1962, *J. Amer. Chem. Soc.*, 84, 3461.
- Kreisler, M. A., Akhmedov, N.A., Arkhipova, S. F., Lipkind, G. M., Popov, E. M., 1974, *J. Chim. Phyc.*, 71, 913.
- Lennard-Jones, J. E., 1924, *Proc. Roy. Soc.*, A106, 463.
- Lomize, A. M., Popov, E. M., 1982, *Bio. Chem.*, 8, (N11), 1474. (Rusça)
- Lomize, A. M., Popov, E. M., 1983, *Mol. Biol.*, 17, (b6), 1212. (Rusça)
- Lumry, R., Eyring, H., 1954, *J. Phys. Chem.*, 58, 110.
- McFarlane, I. D., Graff, D., Grimmelikhuijzen, C. J. P., 1987, *J. exp. Biol.*, 133, 157.
- McFarlane, I. D., Hudman, D., Nothacker, H. P. and Grimmelikhuijzen, C. J. P., 1993, *Proc. R. Soc.*, 253, 183.
- Milburn, G., 1975, *X-Işım Kristalografi (Rusça)*.
- Momany, F. A. Mc. Cuire, R. F., Burgess, A. W., Scheraga, H. A. 1975, *J. Phys. Chem.*, 79, 3261.

- Morse, P. M., Phys. Rev., 1929, 34, 57.
- Oka, M., Baba, Y., Kagemoto, A., Nakajima, A., 1989, Pol. J., 21, (N12), 1011.
- Perezal, A., McAllister, A. M., Csaszar, P., Csizmadia, I. G., 1993, J. Am. Chem. Soc., 115, 4849.
- Ponnuswamy, P. K., Sasisekharan, V., 1971, Biopol., 10, 565.
- Popov, E. M., 1979, Int J. Quant. Chem., 16, 707.
- Popov, E. M., Melnikov, P. N., 1979, Bio. Chem., 5, 1471. (Rusça)
- Popov, E. M., Godjaev, N. M., İsmaylova, L. T., Musayev Ş. M., Aliyev R. E., Akhmedov, N. A., Maksumov, İ. S., 1982, Bio. Chem., 8, (N6). 776. (Rusça)
- Ramachandran, G. N., Ramakrishnan, C., Sasisekharan, V., 1963, J. Mol. Biol., 7, 95.
- Saeisekharan, V., Ponnuswamy, P. K., 1971, Biopol., 10, 583.
- Scheraga, H. A., 1983, Biopol., 23, 1.
- Schmutzler, C., Darmer, D., Dickhoff, D. and Grimmelikhuijzen, C. J. P., 1992, J. Biol. Chem., 267, 22534.
- Schulz, G., Shirmer, R., 1982, Protein Yapısının Prensipleri. (Rusça)
- Scott, R. A., Scheraga, H. A., 1966, J. Chem. Phys., 45, 2091.
- Taniuchi, H., Anfisen, C. B., 1971, J. Biol. Chem., 246, 2291.
- Wallace, B. A., Casio, M., Mielke, D. L., 1986, Proc. Nat. Acad. Sci., 83, (N24), 9423.