چکیده :

در این تحقیق مطالعه ی رابطه ی کمی ساختار–فعالیت (QSAR) بر روی مشتقات سالیسیلانیلید N آلکیل کربومیت به عنوان ترکیبات دارو های آلزایمر انجام شده است. ژنتیک الگوریتم (GA) ،شبکه ی عصبی مصنوعی (ANN)،رگرسیون خطی چندگانه(MLR) ، برای ایجاد مدل های QSAR غیر خطی و خطی مورد استفاده قرار گرفته است. با استفاده روش(B3LYP) DFT و سری پایه 6-31G ساختار های بهینه از این مشتقات بدست آورده شد. ازنرم افزار های Hyperchem، ChemOffice و Gaussian 09W و Dragon برای بهینه سازی مولکول ها و محاسبات توصیفگرهای شیمی کوانتومی استفاده شده است. درنهایت برای آنالیز داده ها از نرم افزار Unscrambler استفاده گردید.

نتایج بدست آمده از این کار نشان می دهد که مدل ANN موفق ترین روش نسبت به سایر روش های آماری می باشد و قابلیت های پیش گویی معقول را دارد .

به طور کلی با بررسی های انجام شده با روشهای GA-PLS و GA-PCR و روش جک نایف در لایه های مختلف ،ترکیبات۲۰و۱۸،۱۷،۱٦،۱ از میان ۲۰ ترکیب مورد بررسی در این تحقیق ،کمترین انحراف ممکن نسبت به هدف را دارند و به عنوان مناسب ترین ترکیبات برای ساخت داروهای ضد بیماری آلزایمر با عملکرد بهتر، پیش بینی می شوند. همچنین بهترین توصیفگرها عبارت اند از :

.G1e، F02[C-N]، T(O..Cl)، GATS6m، GATS6p، Mor02m

کلمات کلیدی: آلزایمر، رابطه ی کمی ساختار- فعالیت(QSAR)، مشتقات سالیسیلانیلید N آلکیل کربومیت ، ژنتیک الگوریتم(GA)، شبکه ی عصبی مصنوعی (ANN)