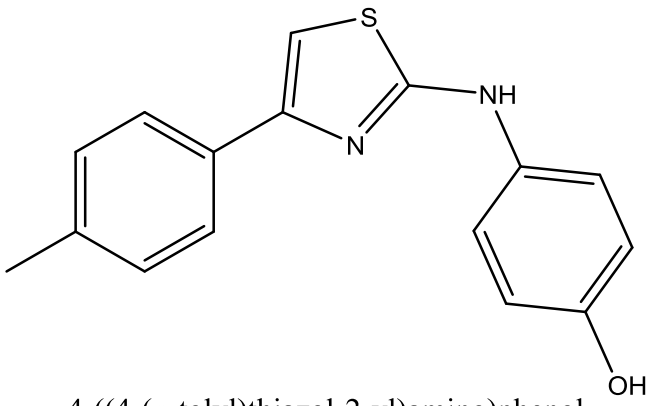
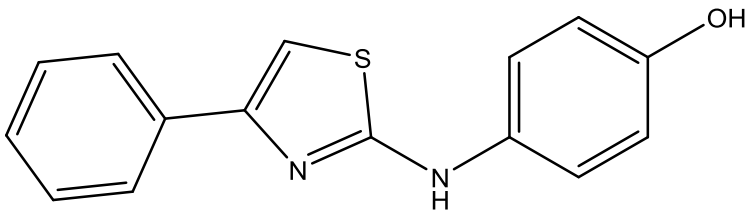
چکیده

بیماری دیابت شایع ترین بیماری متابولیک در انسان شناخته شده است، که نیازمند طراحی داروهای جدید با عملکرد بهتر می‌باشد. در این تحقیق، مطالعه ارتباط کمی ساختار و فعالیت (QSAR) بر روی مشتقات تیازول به عنوان داروهای ضد دیابت انجام شده است. الگوریتم ژنتیک (GA)، الگوریتم رقابت استعماری (ICA)، شبکه عصبی مصنوعی (ANN) و روش رگرسیون خطی چند گانه (MLR) برای ایجاد مدلهای خطی و غیر خطی (QSAR) مورد استفاده قرار گرفته است. با استفاده از روش DFT(B3LYP) و سری پایه 6- 31G(d) ساختارهای بهینه از این مشتقات بدست آورده شد. از نرم افزارهای Hyperchem , Chemoffice Gaussian 03 W و Dragon برای بهینه سازی هندسی مولکولها و محاسبه توصیف گرها ی شیمی کوانتومی استفاده شده است. در نهایت برای آنالیز داده ها از نرم افزار Unscrambler استفاده گردید. بطور کلی با بررسی انجام شده با روشهای GA-PLS , GA-PCR و روش جک نایف در لایه‌های مختلف و اهداف تجربی مختلف، بهترین ترکیبات برای ساخت دارو عبارت اند از: ۱۷ و ۱۹. همچنین بهترین توصیفگرها عبارتند از: Mor23m , nAT , PJI3 , GATS8p .



4-((4-(*p*-tolyl)thiazol-2-yl)amino)phenol

ترکیب شماره ۱۷



4-((4-phenylthiazol-2-yl)amino)phenol

ترکیب شماره۱۹

واژگان کلیدی

ارتباط کمی ساختار- فعالیت – دیابت – الگوریتم ژنتیک – الگوریتم رقابت استعماری- شبکه عصبی مصنوعی.