

مطالعه QSAR بر روی مشتقات 1-آمینو بنزیل -H1 - ایندازول-3- کربوکسی امید برای درمان بیماری هپاتیت C

هادی هندیانی *، 151،

1395-5-26

بیماری هپاتیت C یکی از عوامل شایع ایجاد عفونت مزمن در انسان شناخته شده است، که نیازمند طراحی داروهای جدید با عملکرد بهتر می‌باشد. در این تحقیق، با استفاده از روش ارتباط کمی ساختار و فعالیت (QSAR) بر روی مشتقات، 1-آمینو بنزیل -H1 - ایندازول - 3 - کربوکسی امید، به عنوان داروهای ضد هپاتیت مطالعه شده است. الگوریتم ژنتیک (GA)، الگوریتم رقابت استعماری و خطی مدلهای برای (MLR) گانه چند خطی رگرسیون روش و (ANN) مصنوعی عصبی شبکه، (ICA) غیر خطی (QSAR) ایجاد و مورد استفاده قرار گرفته است. برای این کار ابتدا برنامه ای توسط نرم افزار متلب نوشته شد و توسط برنامه دراگون یک سری از توصیف کننده‌ها تعریف شدند. با استفاده از روش (B3LYP)DFT و سری پایه 6-31G(d) ساختارهای بهینه از این مشتقات بدست آورده شد. همچنین از نرم افزار آماری SPSS برای بدست آوردن بهترین مدل استفاده شد. از نرم افزارهای Hyperchem، W 03 Gaussian Chemoffice و Dragon برای بهینه سازی مولکولها و محاسبه توصیف گرهای شیمی کوانتومی استفاده شده است. در نهایت برای آنالیز داده‌ها از نرم افزار روش و GA-PCR، GA-PLS روشهای با شده انجام بررسی با کلی بطور. گردید استفاده Unscrambler جک نایف در لایه‌های مختلف و اهداف تجربی مختلف، ترکیبات 5 و 10 با کمترین انحراف به عنوان بهترین ترکیبات برای ساخت دارو پیش بینی می‌شوند. همچنین بهترین توصیفگرها عبارتند از: X4A، -RDF120m, Mor20m, GGI2, Mor19v, Mor20v, HATS1m. Methyl 4-((3-((3-carbamoyl-1H indazol-1-yl) methyl) phenyl) amino)-4-oxobutanoate شماره ترکیب 5 10 شماره ترکیب 1-(3-(3-methylbenzamido) benzyl)-1H-indazole-3-carboxamide

کلمات کلیدی : واژگان کلیدی ارتباط کمی ساختار- فعالیت - هپاتیت C - الگوریتم ژنتیک - الگوریتم رقابت استعماری- شبکه عصبی مصنوعی.

[Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database](#)

[دانشگاه آزاد اسلامی، واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها](#)