استفاده از محاسبات QSAR مشتقات بنزوکسازین در درمان سرطان کلون

علي بهمني راد *,151,

1396-6-30

چکیده : در این تحقیق ارتباط کمی ساختار و فعالیت (QSAR) در مشتقات بنزوکسازین مطالعه شده است . الگوریتم ژنتیک (GA) و شبکه های عصبی مصنوعی (ANN) و روش گام به گام رگرسیون خطی چندگانه (stepwiseMLR) برای مدل های خطی و غیر خطی QSAR ایجاد و مورد استفاده قرار گرفته است . با استفاده از روش DFT(B3LYP) و سری پایه 6-311G ساختارهای بهینه از این مشتقات بدست آورده شده است . از نرم افزارهای Hyperchem وChemOffice وGaussian03W وDragon جهت بهینه سازی مولکول ها و محاسبات توصیفگرهای شیمی کوانتومی استفاده شده است . در نهایت برای آنالیز داده ها از نرم افزار Unscrambler استفاده گردید. در پایان با بررسی نتایج حاصل از روش های PCRو PLS و روش جک نایف در لایه های مختلف چند ترکیب به عنوان ترکیبات دارای کمترین انحراف ممکن جهت پیشنهاد برای ساخت داروی مناسب انتخاب گردید . توصیفگرهای انتخابی عبارتند از : MSD , HATS7u , CIC2 ,50-Hypertens کلمات کلیدی : چکیده : در این تحقیق ارتباط کمی ساختار و فعالیت (QSAR) در مشتقات بنزوکسازین مطالعه شده است . الگوریتم ژنتیک (GA) و شبکه های عصبی مصنوعی (ANN) و روش گام به گام رگرسیون خطی چندگانه (stepwiseMLR) برای مدل های خطی و غیر خطی QSAR ایجاد و مورد استفاده قرار گرفته است . با استفاده از روش نرم از . است شده آورده بدست مشتقات این از بهینه ساختارهای 6-311G پایه سری و DFT(B3LYP) افزارهای Hyperchem وChemOffice وGaussian03W وDragon جهت بهینه سازی مولکول ها و محاسبات توصیفگرهای شیمی کوانتومی استفاده شده است . در نهایت برای آنالیز داده ها از نرم افزار Unscrambler استفاده گردید. در پایان با بررسی نتایج حاصل از روش های PCRو PLS و روش جک نایف در لایه های مختلف چند ترکیب به عنوان ترکیبات دارای کمترین انحراف ممکن جهت پیشنهاد برای ساخت داروی مناسب انتخاب گردید . توصیفگرهای انتخابی عبارتند از : MSD , HATS7u , CIC2 , مصنوعی عصبی شبکه , الگوریتم ژنتیک,QSAR مدل ,کلون سرطان : کلیدی کلمات Hypertens-50 PCR,PCA

کلمات کلیدی : سرطان کلون, مدل QSAR,ژنتیک الگوریتم , شبکه عصبی مصنوعی PCA,PCR

Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database
دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها