

استفاده از محاسبات QSAR بر روی مشتقات، 4-(4-nitro-2-phenethoxyphenyl) Pyridine عنوان به دارو در درمان بیماری سندرم کوشینگ

اردوان جهانبخش دهري *,151,

1396-6-28

چکیده یکی از بیماری‌هایی که امروزه در جوامع بشری رو به فزونی است سندرم کوشینگ نامیده می‌شود که سالانه بیش از 10 میلیون نفر را در جهان درگیر می‌کند. این بیماری که به دلیل اختلال در غده هیپوفیز و یا اختلال در غده آدرنال بروز می‌دهد منجر به بیماری خطرناک‌تری مانند سرطان می‌شود. در این تحقیق ارتباط کمی میان مشتقات دارویی پیریدین برای درمان بیماری کوشینگ با کمک محاسبات QSAR صورت گرفته است. الگوریتم ژنتیک (GA)، شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)، و روش رگرسیون خطی چندگانه (MLR) برای مدل‌های خطی و غیرخطی QSAR ایجاد و مورد استفاده قرار گرفت. با استفاده از روش (B3LYP)DFT و سری پایه 6-31G ساختارهای بهینه از این مشتقات به دست آورده شد. از نرم‌افزارهای Chemoffice, Hyperchem, Dragon و Gaussian برای بهینه‌سازی مولکول‌ها و محاسبات توصیفگرهای شیمی کوانتومی استفاده شده است. در نهایت برای آنالیز داده‌ها از Lasso و نرم‌افزار unscrambler استفاده گردید و سرانجام با بررسی روش‌های PCR-GA و GA یافتیم دست دارو ساخت برای ترمناسب‌های ترکیب بینی‌پیش به مختلف‌های لایه ... و PLS

کلمات کلیدی : کلیدواژگان: سندرم کوشینگ، پیریدین، رابطه فعالیت ساختاری کمی (QSAR)، الگوریتم ژنتیک (GA)، شبکه عصبی مصنوعی (ANN)

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

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