محاسبات QSAR بر روی مشتقات اسید آمید چرب به عنوان دارو های ضد اضطراب

فرشید عروجی *,دکتر قاسم قاسمی,

1396-6-30

در این تحقیق مطالعه ی رابطه ی کمی ساختار-فعالیت (QSAR) بر روی مشتقات اسید آمید چرب به عنوان ترکیبات داروهای ضد اضطراب انجام شده است. ژنتیک الگوریتم (GA)، الگوریتم رقابت استعماری (ICA) 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 DFT (B3LYP) و سري پایه6-31G ساختار هاي بهينه از اين مشتقات بدست آورده شد. ازنرم افزار های Hyperchem، توصیفگرهای محاسبات و ها مولکول سازی بهینه برای Dragon و Gaussian 09W، ChemOffice 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 و MLR موفق ترین روش ها نسبت به سایر روش های آماری می باشد و قابلیت های پیش گویی معقول را دارند. بهترین ترکیبات برای ساخت دارو عبارتند از: 7 و 21 و 24 و 25 و 27 و 29. همچنین بهترین توصیفگرها عبارت اند از: G2s و B08[C و MECCو Mor21e و Mor22m و Mor24pو TPSA(NO) و Mor22p و Mor15e و F06[CN]- N].

کلمات کلیدی : کلمات کلیدی: اضطراب، رابطه ی کمی ساختار-فعالیت(QSAR)، مشتقات اسید آمید چرب، ژنتیک الگوریتم(GA)، شبکه ی عصبی مصنوعی (ANN).

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