سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:

مطالعه QSAR برروی مشتقات دی هیدرو پیریدین توسط توصیف گرهای توپولوژیکی و با روش های کمومتریکس .Mean-Centering و M-OSC-PLS

محل انتشار:

ششمین کنگره ملی شیمی و نانو شیمی از پژوهش تا توسعه ملی (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

علی خلیلی
علی نیازی

خلاصه مقاله:

هدف یک مطالعه QSAR به دست آوردن اطلاعات از یک دسته از توصیف کننده های عددی است که ساختار مولکولی را توصیف می کند با استفاده از اطلاعاتی که به دست می آید یک ارتباط بین ساختار و فعالیت برقرار می شود. ساختار مشتقات دی هیدرو پیریدین ابتدا در نرم افزار ChemDraw ترسیم شد و سپس در نرم افزار Chem۳D پهینه سازی مقدماتی با روش نیمه تجربی AM۱ انجام گرفت که با استفاده از ساختار های بهینه شده تعداد زیادی توصیف گر از نرم افزار Dragon به دست آمد . با استفاده از PCA توصیف گرهای وابسته حذف شدند. با روش های Mean-Centering-PLS و M- OSC-PLS نمودارهای ScoreوLoading به دست آمد . با استفاده از این نمودارها و روش PLS به همراه پیش پردازش های یاد شده مدل های کمی مناسبی به دست آمدند. نتایج توافق نزدیکی را بین مقدارهای محاسبه شده و تجربی نشان می دهد که اعتبار این مدل QSAR را اثبات می کند . و در نهایت استفاده از پیش پردازش جهت استفاده در مطالعه QSAR پیشنهاد می گردد

کلمات کلیدی:

دی هیدرویریدین ، . Mean-Centering و ..M-OSC-PLS

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1766875