

## عنوان مقاله:

مدلسازی QSAR فاکتورتمایل برخی پذیرنده های HT6-5

## محل انتشار:

اولین همایش ملی فناوری های نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

## نویسندگان:

هنگامه بهرامی - دانشگاه مازندران

محمدحسین فاطمی - عضو هیئت علمی دانشگاه مازندران

## خلاصه مقاله:

فاکتور تمایل 48 ترکیب انتاگونیست پذیرنده HT6-5 با استفاده از راهکار ارتباط کمی ساختارفعالیت QSAR مدلسازی و پیش بینی گردید در مرحله اول ساختار این ترکیبات توسط نرم افزار Hyperchem رسم شده و با استفاده از روش نیمه تجربی AM1 بهینه گردید سپس از نرم افزار Dragon برای محاسبه توصیف کننده های مولکولی استفاده گردید در مرحله بعدی توصیف کننده های ثابت و وابسته حذف گردیدند و سپس از بین 374 توصیف کننده باقی مانده مهمترین آنها به روش انتخاب متغیر مرحله ای انتخاب شدند تعداد این توصیف کننده ها هفت بوده و جنبه های توپولوژی و الکترونی ترکیبات مورد نظر را نشان میدهد به کمک این توصیف کننده ها یک مدل خطی چندمتغیره ایجاد گردید که دارای اماره های خطای استاندارد  $SE=5/88$  و  $R=0/94$  می باشد اعتبار مدل حاصل توسط روشهای اعتبارسنجی داخلی و خارجی مورد ارزیابی قرار گرفت  $Q2=0/77$  نتایج حاصل موید مناسب بودن مدل مذکور می باشد

## کلمات کلیدی:

پذیرنده HT6-5، مدلسازی QSAR، فاکتور تمایل، رگرسیون خطی چندتایی

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/211750>

