

عنوان مقاله:

مدل سازی ملکولی و مطالعه ی ارتباط ساختار و فعالیت تعدادی از بازدارنده های هیپاتیت B

محل انتشار:

چهارمین کنفرانس ملی تحقیقات نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 11

نویسندگان:

سلیمان ستوده سرونرانی - کارشناس ارشد شیمی تجزیه ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت

قاسم قاسمی گورجی - استادیار گروه شیمی ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت

فتانه هاشمی زاد - کارشناس ارشد شیمی آلی ، دانشگاه تهران

خلاصه مقاله:

مجموعه ای از مشتقات کینولین 1 که ثابت شده می توانند به عنوان بازدارنده ی ویروس هیپاتیت B عمل کنند جهت انتخاب بهترین ساختار تحت مطالعه قرار گرفتند . بدین منظور مطالعات ارتباط کمی ساختار و فعالیت 2 بروی این ترکیبات انجام شد . رگرسیون خطی چند گانه 3 ، حداقل مربعات جزئی 4 ، رگرسیون اجزاء اصلی 5 و محاسبات جک نایف 6 از جمله روش هایی بودند که جهت مطالعات QSAR از آنها بهره گرفته شد . در نهایت از تعداد 35 ترکیب از مشتقات کینولین ، ساختارهای مناسب برای درمان بیماری هیپاتیت B انتخاب و ساخت دارو از روی مناسب ترین ترکیبات به داروساز پیشنهاد گردید

کلمات کلیدی:

شیمی محاسباتی، کمومتریکس، QSAR، هیپاتیت B

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/467434>

