بسم الله الرحمن الرحيم

مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشکده علوم پایه

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی تجزیه

بکارگیری برخی روش های کموانفورماتیکس برای یافتن پیش بینی‌کننده های موثر بر ویژگی فیزیکوشیمیایی یک دسته از رادیوداروها

استاد راهنما:

دکتر فرشته شیری

اساتید مشاور:

دکتر شهین احمدی

دکتر مریم صلاحی نژاد

تهیه و تدوین:

فریبا بامدی

تابستان ۱۴۰۲

چکیده

استفاده از رادیوداروها گسترش قابل توجهی در کاربرد آن‌ها برای اهداف درمانی و تشخیص بیماری‌های غیرتهاجمی از طریق تصویربرداری تشخیصی داشته است. افزایش مدت زمان و هزینه‌های مربوط به کشف و توسعه رادیوداروهای جدید منجر به ایجاد راه‌های بهتری برای انجام سریع‌تر و ارزان‌تر این کار شده است. ما یک مدل رابطه کمی ساختار-ویژگی (QSPR) را برای گروهی از ۱۲۱ ردیاب‌های PET ارائه می‌کنیم که بر اساس چربی دوستی یا مقادیر LogP آن‌ها است. برای ایجاد این مدل، ما از نرم افزار CORAL برای تقسیم تصادفی مجموعه داده به سه مجموعه استفاده کردیم: یک مجموعه آموزشی (۵۰٪)، یک مجموعه کالیبراسیون (۲۵٪) و یک مجموعه اعتبار (۲۵٪). توصیف‌کننده بهینه ترکیبی با استفاده از ترکیبی از توصیف‌کننده‌های مولکولی SMILES و گراف بدون هیدروژن (HSG) محاسبه می‌شوند و مدل‌های QSPR از طریق الگوریتم مونت کارلو تولید می‌شوند. مدل های‌ساخته شده پایداری قوی در رابطه با معیارهای آماری از خود نشان دادند. در نتیجه، جزئیات ساختاری استخراج شده از توصیف‌کننده‌های مدل، بینش ارزشمندی را برای افزایش/کاهش LogP ارائه می‌کند.

کلمات کلیدی: کورال، اسمایلز، رادیوداروها، ردیاب‌های PET

Abstract

The utilization of radiopharmaceuticals has seen remarkable expansion in their application for therapeutic purposes and non-invasive disease diagnosis through diagnostic imaging. The rising durations and expenses involved with the discovery and development of novel radiopharmaceuticals have led to the creation of better ways to do this job faster and cheaper. We present a quantitative structure-property relationship (QSPR) model for a group of 121 PET tracers, which is based on their lipophilicity or LogP values. To create this model, we used CORAL software to randomly divide the dataset into three sets: a training set (50%), a calibration set (25%), and a validation set (25%). The hybrid optimal descriptor is computed using a combination of SMILES and Hydrogen- Suppressed Graph (HSG) molecular descriptors, and the QSPR models are generated through the Monte Carlo algorithm. The constructed models exhibited strong stability in relation to statistical metrics. In conclusion, the structural details extracted from the model descriptors provide valuable insight for the increase/decrease of LogP.

Keywords: CORAL, SMILES, Radiopharmaceuticals, PET tracers

University of Zabol
Graduate school
Department of Chemistry

The Thesis Submitted for The Degree of Master of sciences (In the field of Analytical Chemistry)

Applying some cheminformatics methods to find effective predictors on physicochemical properties of a set of radiopharmaceuticals

Supervisor:

Dr. Fereshteh Shiri

Advisors:

Dr. Shahin Ahmadi

Dr. Maryam Salahinejad

By: Fariba Bamedi

1402