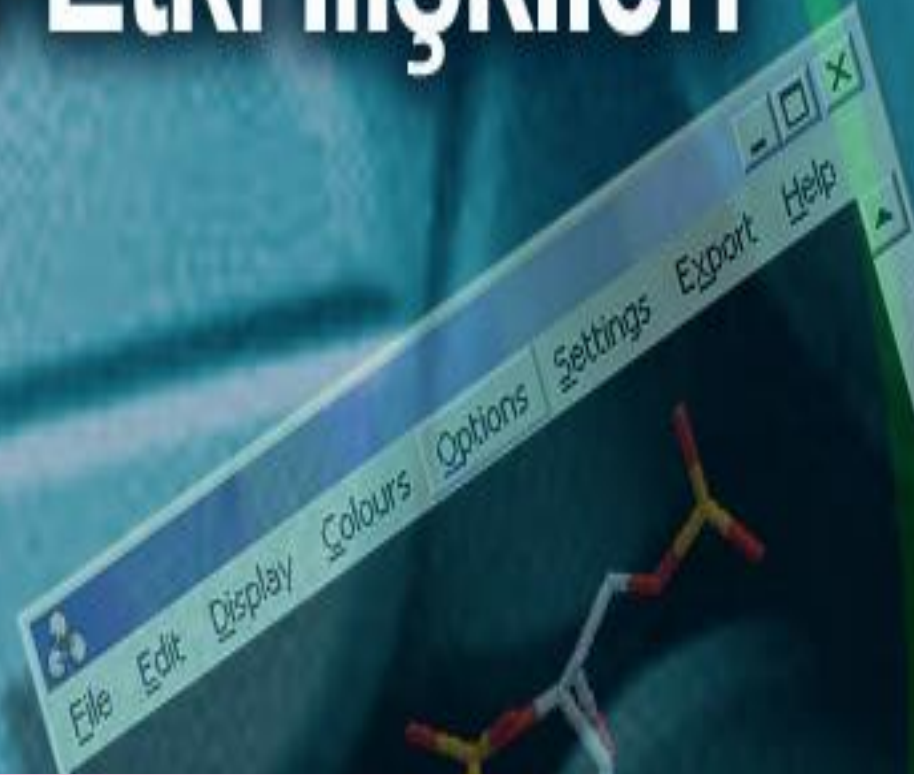


# İlaç Etken Madde Tasarımında Kantitatif Yapı-Etki İlişkileri

QSWR



# QSAR Analizi Nedir?

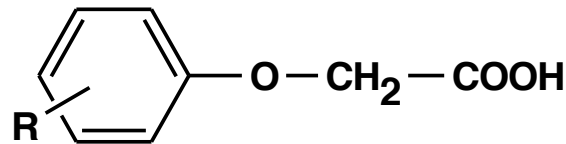
# QSAR

Kimyasal Bileşiklerin  
**Yapısal / Fizikokimyasal**  
**Özellikleri (*Moleküler Nitelikleri*)**  
ile **Biyolojik Aktiviteleri** Arasındaki  
**İlişkileri** Matematiksel Yöntemlerle  
**Nicel Olarak Çözümleme**  
Çalışmalarıdır.

## İLK ÇOK PARAMETRELİ QSAR ANALİZİ

**HANSCH, C.**, MALONEY, P.P., **FUJİTA, T.** and MUIR, R.M.,  
*Nature* (London), 194, 178 (1962).

ROBERT MUIR'in (Botanikçi, Iowa Üniversitesi, Iowa) ARAŞTIRDIĞI, 3 veya 4 Sübstitüe FENOKSİASETİK ASİT TÜREVİ BİLEŞİKLERİN BİTKİ BÜYÜMESİNİ REGÜLE EDEN AKTİVİTELERİ ÜZERİNE GERÇEKLEŞTİRİLEN QSAR ÇALIŞMASIDIR.



$$\log 1/C = - 2.14 \pi^2 + 4.08 \pi + 2.78 \sigma + 3.36$$

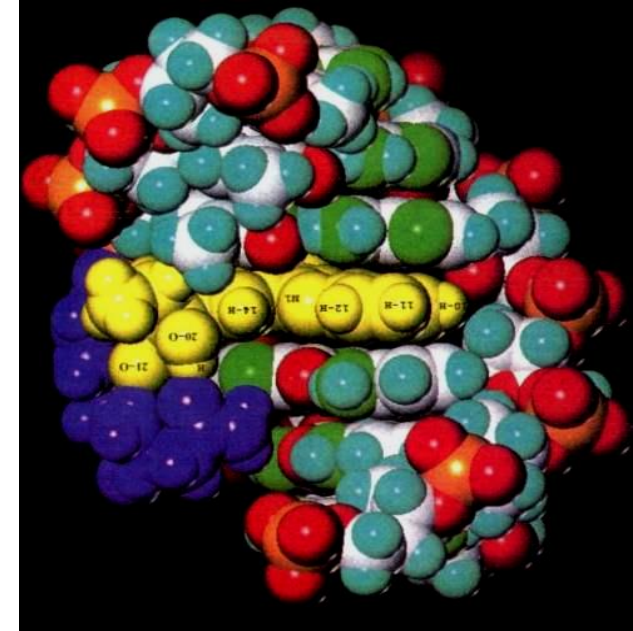
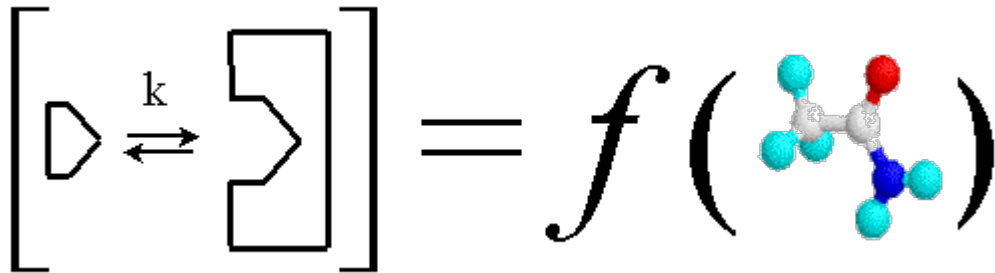


Euro-QSAR 2004 Istanbul Symposium > 05-10 September 2004 Istanbul, Turkey > <http://pharmacy.ankara.edu.tr/~sener>

Corwin HANSCH, Toshio FUJITA

# Hansch Analizleri

1868 Crum Brown ve Fraser ➤  $BA = f(C)$



**Biyolojik Etki =  $f$ (Fizikokimyasal Özellikler) + c (sabite)**

**Biyolojik Etki =  $f$ (Hidrofobik + Elektronik + Sterik Özellikler) + c**

# Hansch Analizleri

>> Matematiksel Tanımlama

$$\log 1/C = f_h (x)_h + f_e (x)_e + f_s (x)_s + c$$

$f_h (x)_h$	HİDROFOBİK (LİPOFİLİK) ÖZELLİKLER
$f_e (x)_e$	ELEKTRONİK ÖZELLİKLER
$f_s (x)_s$	STERİK ÖZELLİKLER
<b>c</b>	KORELASYON SABİTESİ

# Hansch Analiz Metodu

$$\log 1/C = 0.96(\pm 0.04)\log P - 1.41(\pm 0.12)\log(\beta \cdot 10^{\log P} + 1) + 1.31(\pm 0.09) \quad (16)$$

$$n = 11, \quad r^2 = 0.998, \quad s = 0.050, \quad q^2 = 0.996$$
$$\text{Log } P_o: 3.89 \quad \text{Log } \beta: -3.555$$

Reference: Kubinyi H, Kehrhardt H. *Arzneim-Forsch.* 1978, 28: 589-601



Corwin HANSCH