Laboratoire de développement durable
Faculté des sciences et technologies
Université Sultan Moulay Slimane
B.P.523, Beni Mellal, Maroc

Siham LAKRIKH, Ahmed JOUIATI ; Latifa LAALLAM

Résumé

Titre : modélisation QSAR et calculs lipinski sur dérivés de la 1,2-benzodiazole.

La relation entre activité biologique des composés avec leur structure moléculaire constitue un moyen de prédiction dans la conception rationnelle de médicaments. Les relations quantitatives structure à activité (QSAR) est l'un des domaines les plus importants en chimiométrie, elles sont basées sur l'élaboration d'équations mathématiques reliant la structure chimique d'un composé à son activité biologique. QSAR est un procédé de corrélation de la structure moléculaire, ou ces propriétés dérivées avec un type particulier d'activité biochimique. Les propriétés des composés sont déterminées par la méthode de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT). La correspondance entre les descripteurs et l'activité expérimentale fait appel à la régression linéaire multiple (RLM).

Dans le présent travail, nous avons procédé par l'approche mentionnée au paragraphe ci-dessus au test de vingt-deux composés chimiques avec la même molécule mère mais avec des groupements fonctionnels différents. Les résultats obtenus montrent une bonne corrélation entre structure/activité biologique (IC50). Pour une éventuelle utilisation de ces molécules dans le domaine pharmaceutique on a étudié leur conformité aux règles de lipinski.

Abstract

Title : QSAR modeling and Lipinski calculations on 1,2-benzodiazole derivatives.

The relationship between the biological activity of compounds with their molecular structure constitutes a way of predicting in rational drug design. Quantitative Structure-Activity Relationships (QSARs) is one of the most important areas in Chemo metrics, it is based on the development of mathematical equations linking the chemical structure of a compound to its biological activity. QSAR is an attempt to correlate the molecular structure, or properties derived from the molecular structure

with a particular type of biochemical activity. The properties of the compounds can be determined by the DFT method, and to quantify the relationship between descriptive and experimental activity multiple linear regression (MLR) is used.

We worked, following the previous approach, on Twenty-two chemical compounds with the same parent molecule but with different functional groups. The results show a good correlation between structure / biological activity (IC50). And for a possible use of these molecules in the pharmaceutical field, we studied their compliance with Lipinski rules.