

QSAR

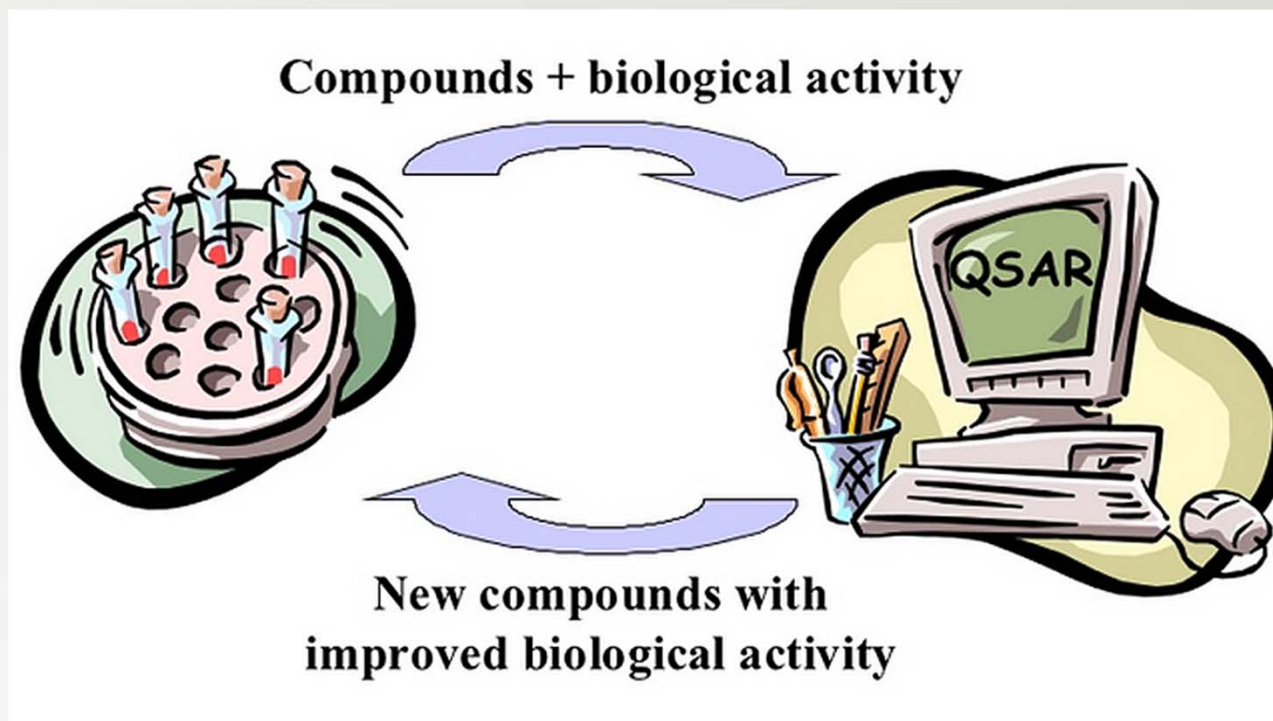
Quantitative Structure
Activity Relationship

강보람 이은지 황보영

INDEX

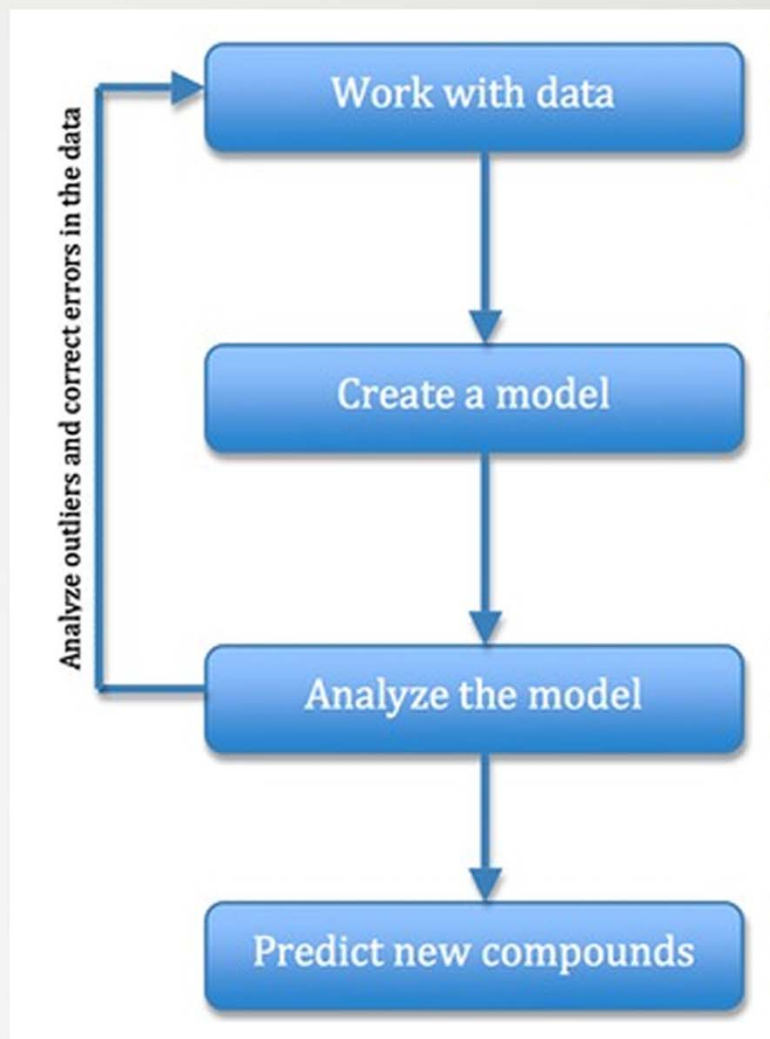
1. Definition
2. Methods
3. Variety
4. Application
5. Example

1. QSAR이란?



- Quantitative Structure Activity Relationship
- 물질이 가지고 있는 화학 구조를 이용하여 물성 혹은 독성을 계산하는 방법

2. QSAR의 방법



- 데이터 수집 & 정리
- Training set과 test set으로 구분
- 사용할 Descriptor 선정
- Machine learning 방법 결정
- 모델 검증
- 공유 & 응용

2-1. QSAR 프로그램

a. EPI (Estimation Programs Interface) Suite

- 물리화학적 특성과 환경학적 경로를 예측하는 윈도우 기반 프로그램

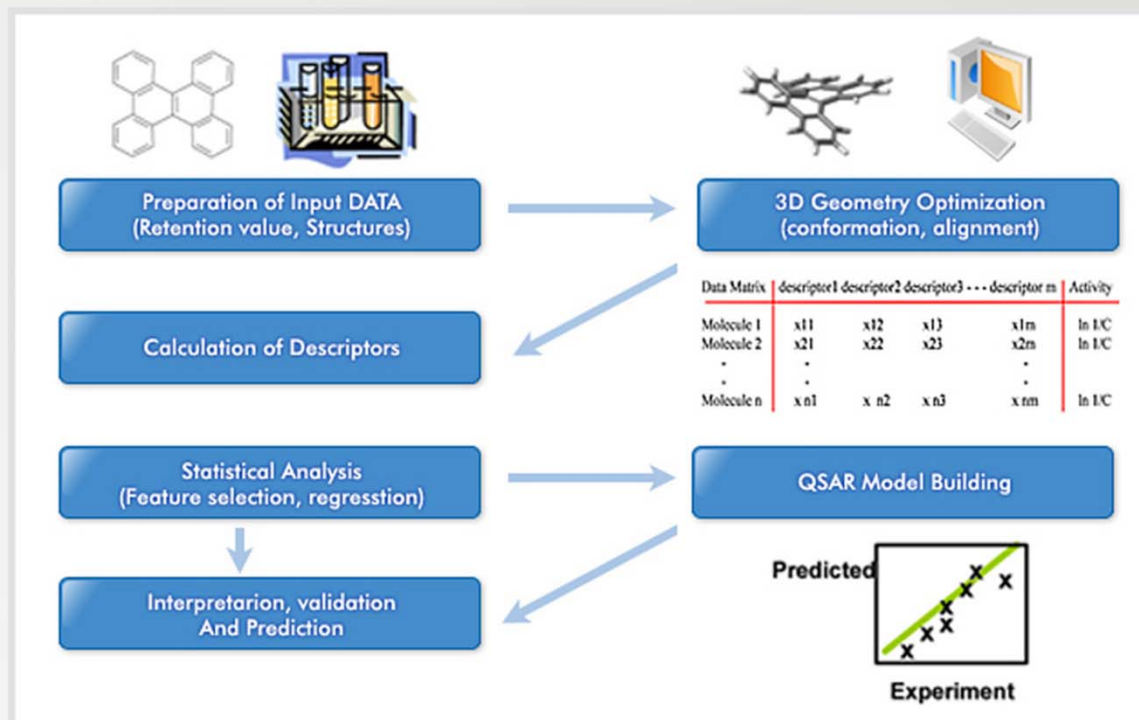
b. TOPKAT

- 일정한 프로토콜에 의해 생산된 시험 데이터에 기반한 신뢰성이 있는 모델을 이용
- 최적 예측 공간 기술을 이용하여 연구 중인 화합물이 모델에 잘 표현되었는지를 검증
- 물리화학적, 환경학적 경로, 생태독성, 독성, 돌연변이 유발성 등을 포함한 실험에 사용

c. Derek for Windows

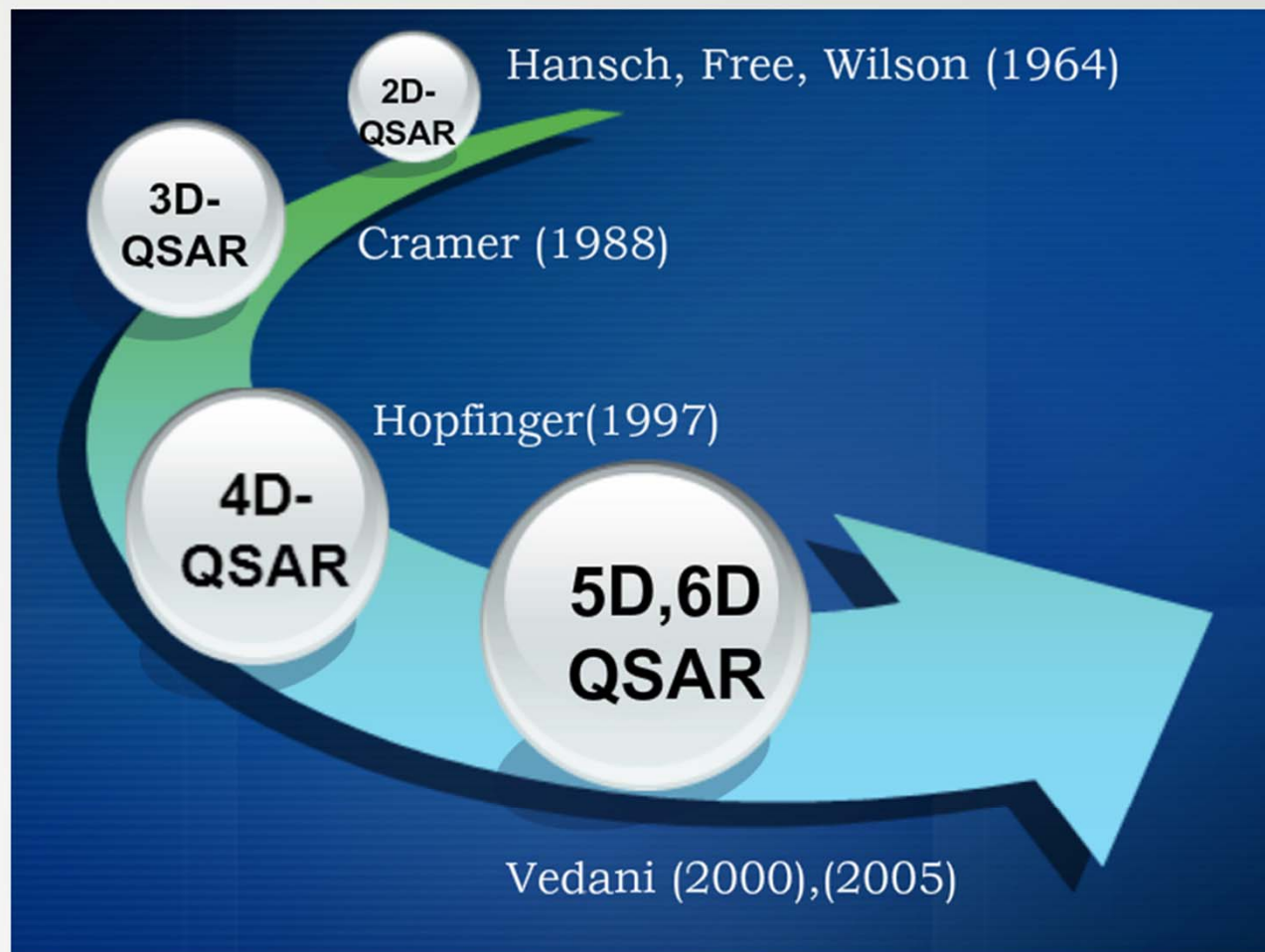
- 화합물이 인체, 포유동물, 박테리아에서 독성을 나타낼 것인가 예측
- 적용점(endpoint)에 대한 대용량 스크리닝(screening)에 적합

2-2. QSAR 모델 개발



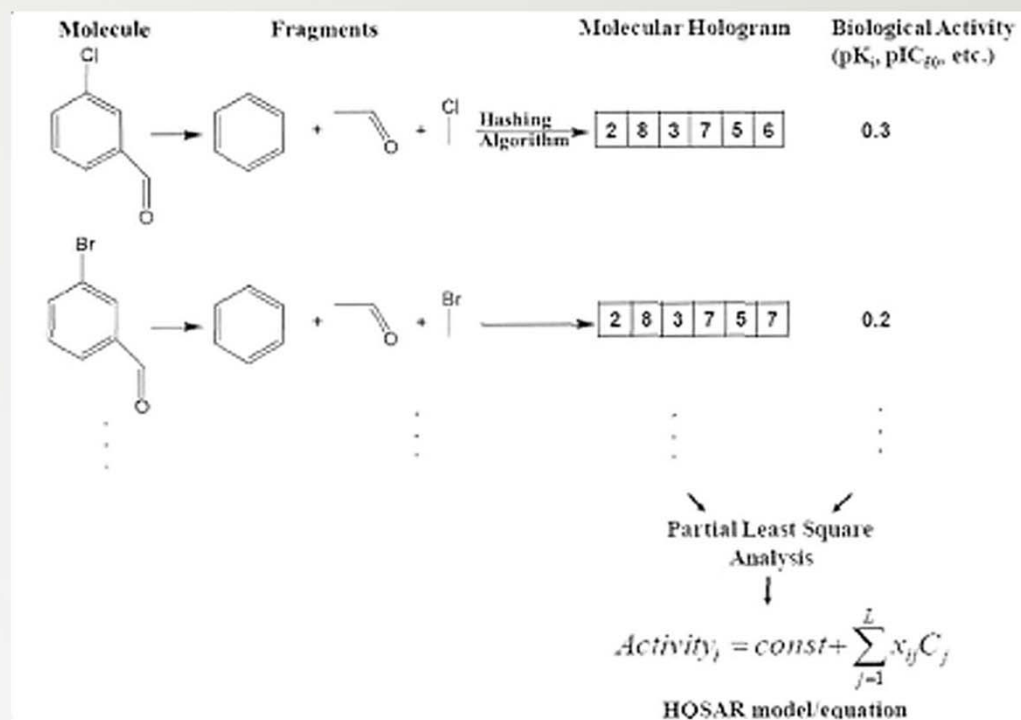
- 화합물의 독성실험 데이터를 수집
- 3차원 구조결정, 화합물간 정렬 등의 과정
- 화합물의 구조에서 화합물의 표현자를 계산
- 통계적인 방법으로 QSAR 모델 완성
- 상관계수 분석 등을 통하여 신뢰도를 평가
- 반복

3. QSAR의 발전



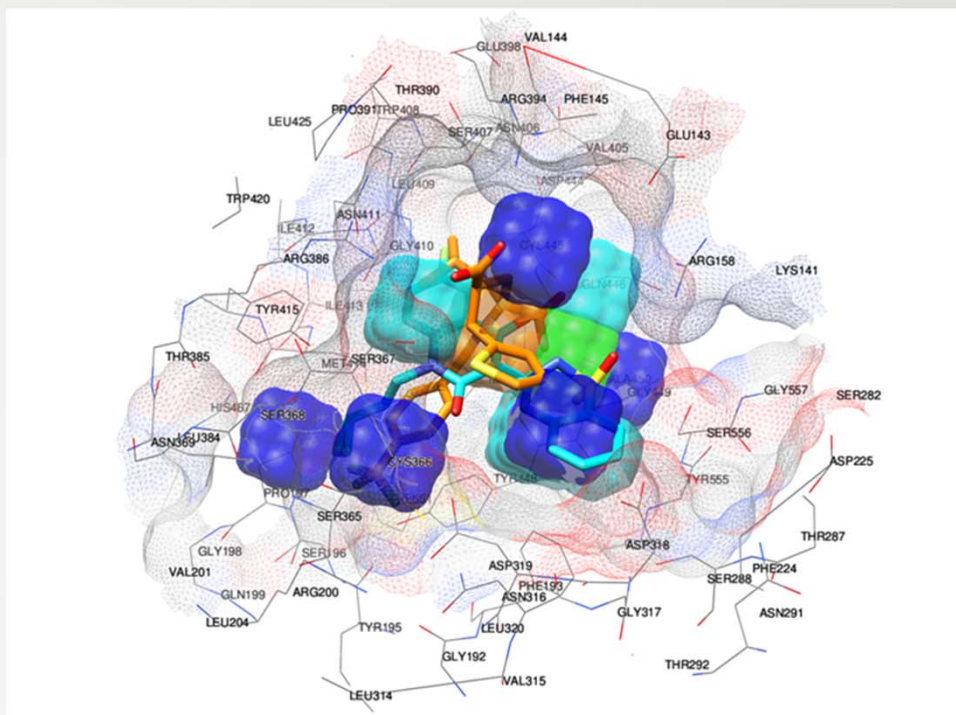
3-1. 2D-QSAR

VARIETY



- 정량적 예측을 실행하기 위해 2차원 분자의 치환기 또는 분획
- 그들의 물리 화학적 성질을 이용

3-2. 3D-QSAR



- 2차원의 예측 정확도를 개선하기 위하여 개발
- 연구를 위한 원형으로 리간드의 실험적 또는 계산적으로 유도된 생물활성 구조가 필요

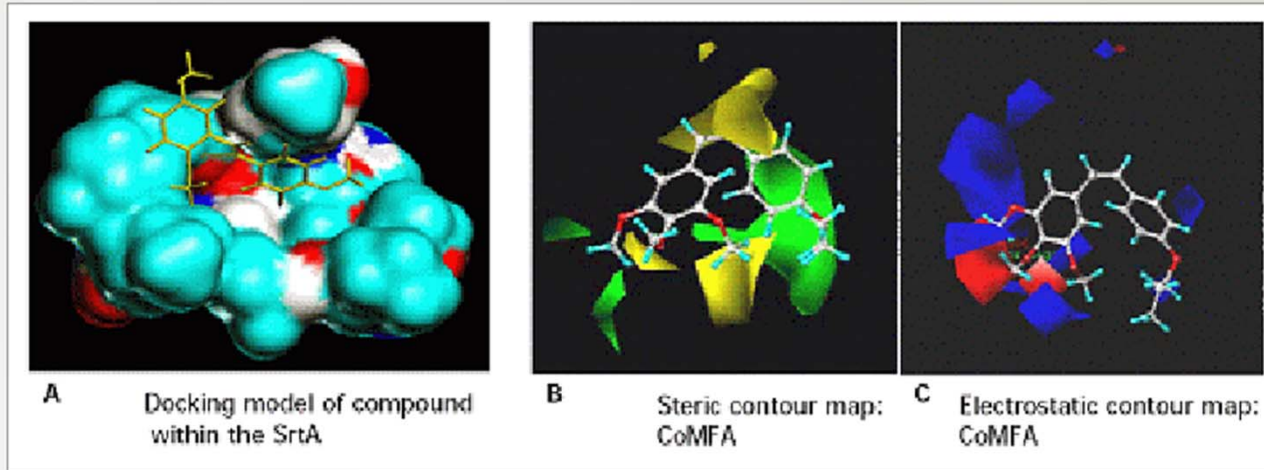
4. QSAR의 활용분야

- 분자 단위공정에서 가치 있는 주요 사항을 찾아내기
- 보유 데이터의 조직적 이용의 극대화를 위한 데이터 베이스 검색 및 분석
- 실험과 신물질에 대한 구상과 해석
- 집중적 실험을 위한 후보 대체 물질의 선별 및 서열화

5. QSAR의 이용사례

- a. 독일의 바스프사
분자 모델링 소프트웨어를 제약, 고분자, 염료 그리고
정밀화학분야에 이용
- b. 미국 Calgon사
무기물 스케일 생성을 억제하는 고분자 억제제를 개발
- c. 일본 수미토모 화학
양자 화학 기법을 이용하여 자동차 촉매로 이용되는
제올라이트의 특성 분석
- d. 화장품 등 낮은 단계의 독성시험시 이용되는 시험동물의 보호
- e. 수용체 결합, 효소 억제 등을 포함한 내분비교란물질의 QSAR
방법 개발

5-1. QSAR의 대표적인 사례



- Drug design에 가장 강력한 도구
- Steric field와 Electrostatic field에 대한 Mapping을 통하여 분자의 물리 화학적 성질과 생리활성 간의 상관성을 연구하는 방법
- 3D-QSAR은 신약 개발 및 물질의 성질을 최적화 하고자 하는 여러 연구분야에서 중요한 도구로 사용

**THANK
YOU!**