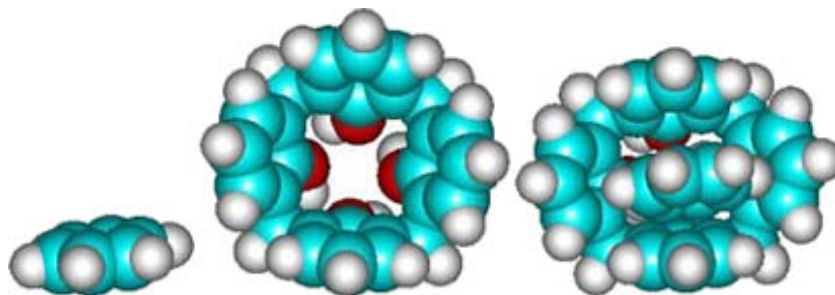


**Irina-Claudia ALEXA**

**STUDIUL RELAȚIEI STRUCTURĂ-  
ACTIVITATE BIOLOGICĂ.  
DRUG DESIGN**  
*Note de curs și seminar*



**EDITURA ALMA MATER BACĂU**  
**2017**

## CUPRINS

<b>NOȚIUNI INTRODUCTIVE</b> .....	5
Scurt istoric .....	5
Drug design, activitate biologică, efect farmacodinamic .....	6
Factori care influențează acțiunea medicamentelor .....	10
<b>ASPECTE CANTITATIVE ALE RELAȚIEI STRUCTURĂ-ACTIVITATE</b> ....	13
Principalii parametri fizico-chimici studiați în QSAR .....	17
Parametri hidrofobi.....	17
Parametri electronici.....	25
Parametri sterici.....	31
Alți parametri fizico-chimici .....	35
Ecuția lui Hansch.....	36
Diagramele lui Craig .....	40
Schemele lui Topliss.....	42
Bibliografie selectivă.....	47
<b>BIOIZOSTERISM, BIOIZOSTERI</b> .....	49
Noțiuni introductive.....	49
Clasificarea bioizosterismului: clasic și non-clasic .....	52
Bioizosterismul ca o strategie a modificării moleculare .....	53
Bioizosterismul și modificările proprietăților fizico-chimice .....	54
Bioizosterismul clasic.....	54
Bioizosterismul non-clasic .....	58
Bibliografie selectivă.....	65
<b>PLANIFICAREA UNUI STUDIU RSA CANTITATIV</b> .....	67
<b>EXEMPLE DE CERCETĂRI PRIVIND STUDIUL RELAȚIEI STRUCTURĂ-ACTIVITATE BIOLOGICĂ</b> .....	73
Studiul relației structură-activitate biologică în cazul flavonoidelor.....	73
Conceptul de chimiotecă .....	78
Abordarea conceperii de molecule ce pot interacționa cu ținte biologice.....	81
Bibliografie selectivă.....	95
Date despre autor .....	96