

**Naziv projekta:**

Hemometrijski pristup konceptu održivog razvoja u oblasti kontinualnog dizajniranja antikancerogenih molekula prema ćelijama kancera prostate

**Broj projekta:**

114-451-347/2015-02

**Izvori finansiranja projekta:**

Pokrajinski sekretarijat za visoko obrazovanje i naučnoistraživačku delatnost

**Trajanje projekta:**

2015 – 2016.

**Budžet projekta:**

802.747,00 RSD

**Logo projekta ili akronim:**

-

**Oblast istraživanja kojoj pripada projekt:**

Prirodno-matematičke nauke

**Rukovodilac projekta:**

dr Sanja Podunavac-Kuzmanović, redovni profesor, Tehnološki fakultet Novi Sad, Univerzitet u Novom Sadu

**Članovi istraživačkog tima:**

dr Lidija Jevrić, Tehnološki fakultet Novi Sad, Univerzitet u Novom Sadu

dr Radomir Malbaša, Tehnološki fakultet Novi Sad, Univerzitet u Novom Sadu

dr Strahinja Kovačević, Tehnološki fakultet Novi Sad, Univerzitet u Novom Sadu

**Ključne reči:**

Hemometrija, QSAR modelovanje, Biološki aktivna jedinjenja, Steroidi

**Kratak pregled projekta:**

Istraživanja sprovedena u okviru projekta zasnovana su na računarskom modelovanju antikancerogenih jedinjenja pomoću adekvatnih računarskih programa za molekulski dizajn i na hemometrijskoj analizi njihove antikancerogene aktivnosti i hromatografskog ponašanja. Hemometrija, kao relativno mlada naučna disciplina, aplikativna je kod analize, tumačenja i obrade podataka iz različitih naučnih disciplina.

U okviru ovog projekta sprovedena su ispitivanja korelacija između hemijske strukture i antikancerogene aktivnosti molekula prema ćelijama kancera prostate PC-3 (sa akcentom

na različitim steroidnim derivatima), kao i korelacija različitih fizičko-hemijskih osobina molekula sa strukturnim deskriptorima i prediktorima farmakološke aktivnosti. QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships) i QSRR (Quantitative Structure-Retention Relationships) analize steroidnih derivata sa antikancerogenom aktivnošću sprovedene su primenom različitih matematičkih i statističkih metoda, kao što su: linearna regresija (LR), multipla linearna regresija (MLR), analiza glavnih komponenata (PCA), hijerarhijska klaster analiza (HCA), regresija glavnih komponenata (PCR), regresija parcijalnih najmanjih kvadrata (PLS), veštačke neuronske mreže (ANN). Kvalitet dobijenih matematičkih modela potvrđen je na osnovu vrednosti određenih statističkih parametara. Za validaciju modela primenjene su interna validacija, kao i mnogo rigoroznija procedura eksterne validacije koja podrazumeva upotrebu spoljašnje grupe molekula koja nije upotrebljena za definisanje modela.

Dobijeni rezultati omogućavaju predviđanje antikancerogene aktivnosti struktorno sličnih steroidnih derivata i na taj način omogućavaju odabir derivata sa značajnom antikancerogenom aktivnošću, te mogu biti primjenjeni kao određene smernice za dalje sinteze potencijalnih novih terapeutika. Takođe, dobijene QSRR relacije značano doprinose definisanju tzv. hromatografske lipofilnosti steroidnih derivata, kao jednog od faktora ključnih za distribuciju molekula u biološkom sistemu.

#### **Grafički abstrakt ili grafički prikaz rezultata projekta:**

