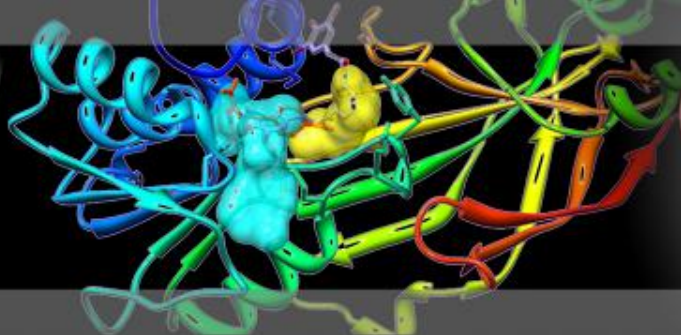




**Sviluppo, validazione ed applicazione di
una procedura alternativa per la
costruzione e l'analisi grafica di relazioni
quantitative struttura-attività di tipo
tridimensionale (3-D QSAR).**

Relatore: Prof. Rino Ragno

Laureando: Flavio Ballante

- (1979)

The Lattice Model: A General Paradigm for Shape-Related Structure/Activity Correlation, Cramer, R.D., and Milne, M., *Abstracts ACS Meeting*, Honolulu, 1979, COMP 44.

- (1986)

S. Wold, A. R., H. Wold, and W. J. Dunn, III, **The Collinearity Problem in Linear Regression. The Partial Least Squares (PLS) Approach to Generalized Inverses.** *SIAM J. Sci. and Stat. Comput.* 1984 5, (3), 735-743

- (1988)

Richard D. Cramer, I., David E. Patterson, and Jeffrey D. Bunce, Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA). 1. **Effect of Shape on Binding of Steroids to Carrier Proteins.** *J. Am. Chem. Soc.* 1988, (110), 5959-5967.

- (1993)

Baroni, M.; Costantino, G.; Cruciani, G.; Riganelli, D.; Valigi, R.; Clementi, S., Generating Optimal Linear Pls Estimations (Golpe) - an Advanced Chemometric Tool for Handling 3d-Qsar Problems. *Quant Struct-Act Rel* 1993, 12, (1), 9-20.

- (1994)

Cruciani, G.; Watson, K. A., Comparative Molecular-Field Analysis Using Grid Force-Field and Golpe Variable Selection Methods in a Study of Inhibitors of Glycogen-Phosphorylase-B. *Journal of Medicinal Chemistry* 1994, 37, (16), 2589-2601.

Sviluppo 3-D QSAR

1988

1994

3-DQ SAR

Sviluppo Tecnologico, Dati Disponibili...

REQUISITI ODIERNI DI ANALISI

- VELOCITA'
 - VERSATILITA'
 - CAPACITA' DI ELABORARE GRANDI QUANTITA' DI INFORMAZIONI
 - SPECIFICITA'
 - SENSIBILITA'
 - BASSI COSTI
- 

