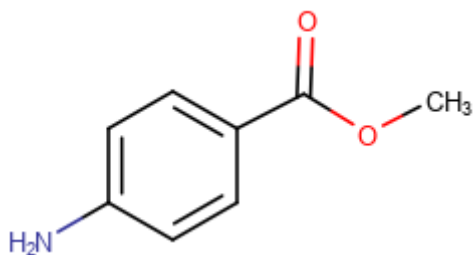


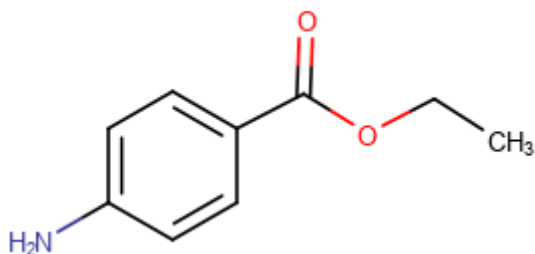
Praktikum z QSAR

Korelace anestetického indexu *Carassius carassius* s hodnotami Taftovy sterické konstanty pro příslušné alkyly pro sadu esterů 4-aminobenzoové kyseliny

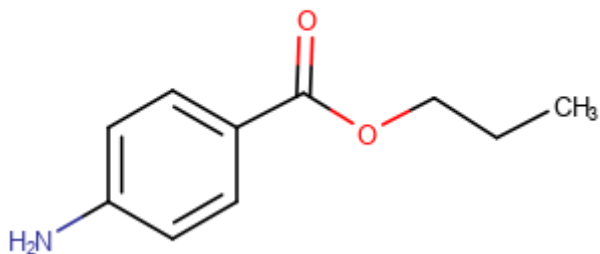
Struktury studovaných anestetik (program MarvinSketch):



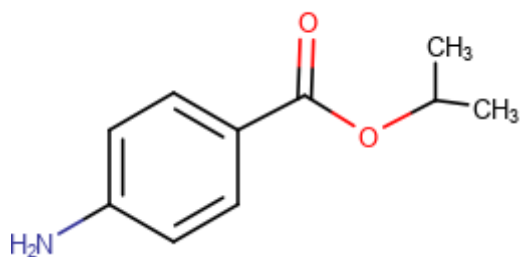
Methyl-4-aminobenzoát



Benzokain



Propyl-4-aminobenzoát

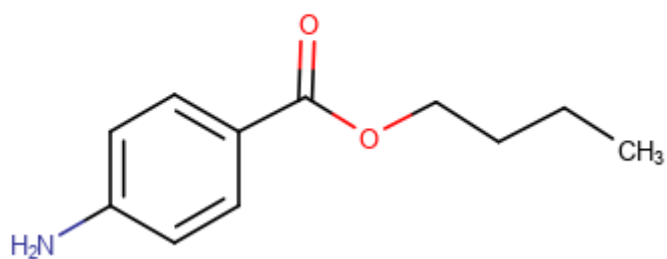


2-propyl-4-aminobenzoát

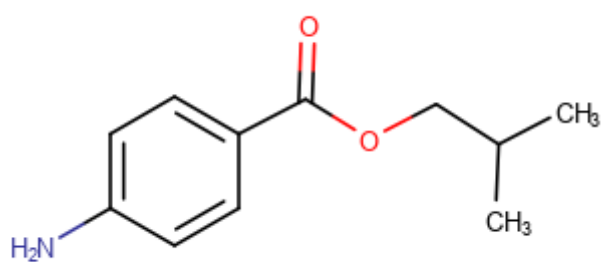
Barbora Tvarůžková

F17153

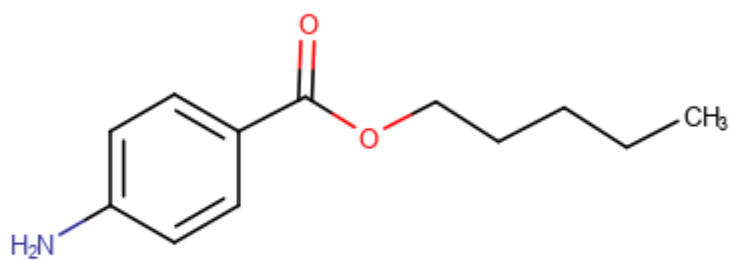
22.4.2020



Butyl-4-aminobenzoát



Iso-butyl-4-aminobenzoát



Pentyl-4-aminobenzoát

Lineární regrese:

Vstupní data:

Anestetikum	Anestetický index [A]	Sterický parametr[E_s]
Methyl-4-aminobenzoát	0,4	0
Benzokain	1	-0,07
2-propyl-4-aminobenzoát	2	-0,47
Propyl-4-aminobenzoát	2,5	-0,36
Iso-butyl-4-aminobenzoát	3,2	-0,93
Butyl-4-aminobenzoát	4,3	-0,39
Pentyl-4-aminobenzoát	4,6	-0,40

Výsledky:

-3,01911	1,4414
1,902422	0,8901
0,334974	1,4131
2,518508	5

a	b
s_a	s_b
r^2	s_y
F	d_f

Rovnice:

$$A = a_1x + b$$

$$A = -3,01911 * E_s + 1,4414$$

Hodnota Fisher-Snedecorova testu: $F = 2,518508$

Lineární kolerační koeficient: $r = 0,57876593 \doteq 0,58$

Závěr:

Anestetický index *Carassius carraius* pro studovaná anestetika nekoleruje, protože hodnota je $r = 0,58$.