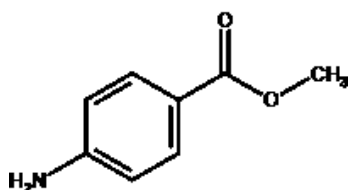


# Molekulární základy vývoje léčiv

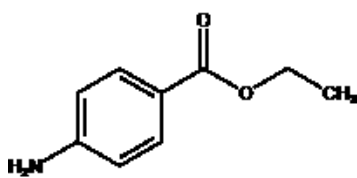
Zuzana Kašpárková, F17054

Korelace anestetického indexu Carrassius auratus s experimentálně stanovenou hodnotou logP (oktanol/voda) pro soubor methyl-4-aminobenzoát, benzokain, propyl-4-aminobenzoát, butyl-4-aminobenzoát, pentyl-4-aminobenzoát, hexyl-4-aminobenzoát, heptyl-4-aminobenzoát. Pokud se korelace potvrdí, vypočtete předpokládanou aktivitu lidokainu.

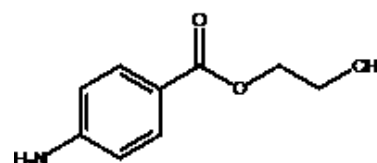
## Struktura anestetik:



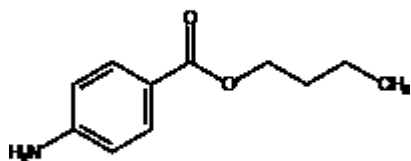
Methyl-4-aminobenzoát



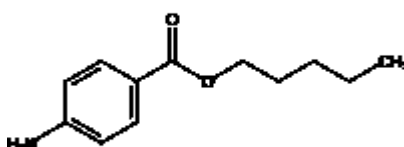
Benzokain



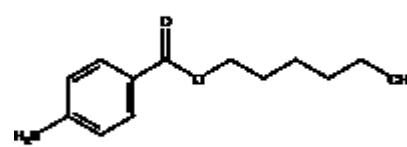
Propyl-4-aminobenzoát



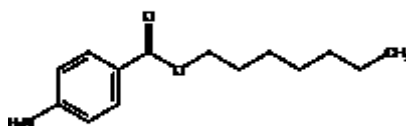
Butyl-4-aminobenzoát



Pentyl-4-aminobenzoát



Hexyl-4-aminobenzát



Heptyl-4-aminobenzoát

## Hodnoty aktivit a logP anestetik:

	anestetický index	logP (oktanol/voda)
methyl-4-aminobenzoát	0,47	1,63
benzokain	1	2,15
propyl-4-aminobenzoát	2,37	2,82
butyl-4-aminobenzoát	4,49	3,31
pentyl-4-aminobenzoát	4,54	3,78
hexyl-4-aminobenzoát	5,41	4,25
heptyl-4-aminobenzoát	5,49	4,8

**Výsledky:**

Rovnice lineární regrese	$y = 1,7841x - 2,4$
Lineární korelační koeficient R	<b>0,9657</b>
Hodnota Fischer-Snedecorova testu F	<b>69,1651</b>

**Předpokládaná aktivita lidokainu:**

$$\log P (\text{lidokain}) = 2,44$$

$$y = 1,7841x - 2,4 = 1,7841 \cdot 2,44 - 2,4 = \mathbf{1,95}$$

Předpokládaný anestetický index lidokainu je 1,95.