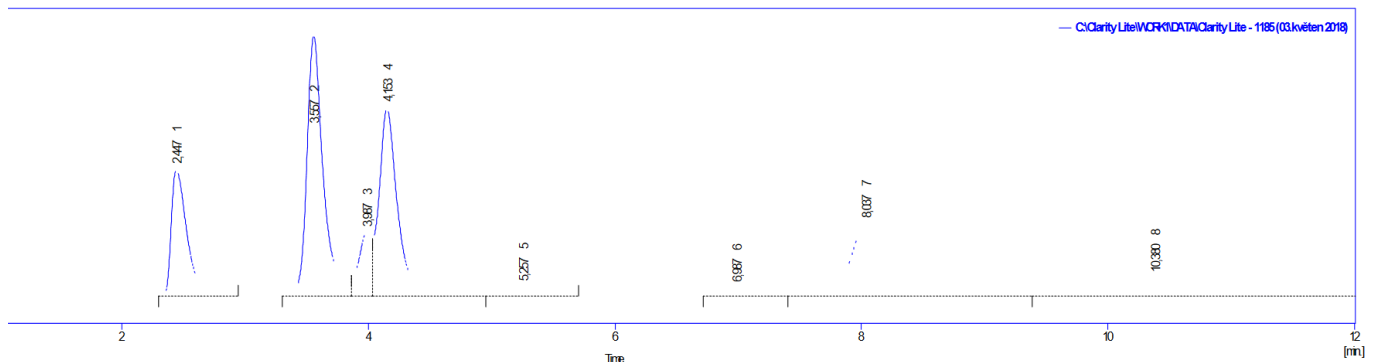


## Praktikum z QSAR – zjištění závislosti účinnosti nebo toxicity lokálních anestetik na hydrofobním či sterickém strukturním parametru

RP-HPLC: Zjistěte, zda existuje korelace logaritmu převrácené hodnoty relativní infiltrační aktivity, tj.  $\log(1/A)$ , s  $\log k'$  pro „koktejl“ lokálních anestetik K2 o složení benzokain(2), artikain(3), lidokain(4), prokain(6), tetrakain(7), cinchokain(8),  $\text{NaNO}_2$ (1). Čísla v závorkách jsou čísla píků na chromatogramu. Pokud se korelace potvrdí ( $r \geq 0,6$ ), vypočtěte předpokládanou aktivitu pentyl-4-aminobenzoátu(5).

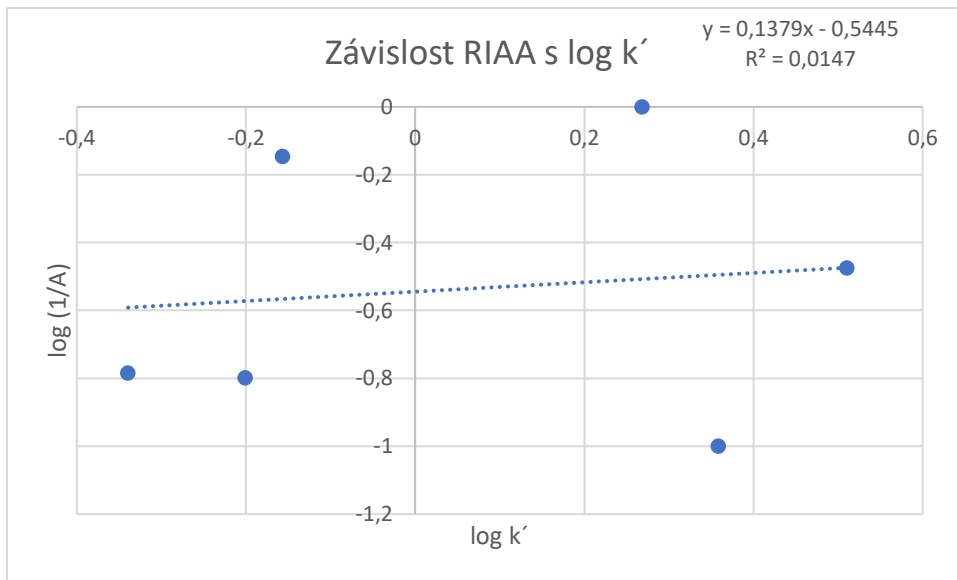
Chromatogram:



	<i>rel. Infil. anest. aktivita</i>	<i>log (y)</i>	<i>HPLC</i>	<i>log k' (x)</i>
<i>benzokain</i>	6,1	-0,785329835	3,567	-0,33942
<i>artikain</i>	6,3	-0,799340549	3,987	-0,20111
<i>lidokain</i>	1,4	-0,146128036	4,153	-0,15665
<i>prokain</i>	1	0	6,987	0,268422
<i>tetrakain</i>	10	-1	8,037	0,358778
<i>cinchokain</i>	2,99	-0,475671188	10,38	0,510803
<i>NaNO<sub>2</sub></i>			2,447	
<i>pentyl-4-aminobenzoát</i>			5,257	

Lineární regrese:

<b>a=</b> 0,13786745	<b>b=</b> -0,544540702
<b>S<sub>a</sub>=</b> 0,564956537	<b>S<sub>b</sub>=</b> 0,184785204
<b>r<sup>2</sup>=</b> 0,014669501	<b>S<sub>y</sub>=</b> 0,441062705
<b>F=</b> 0,059551597	<b>d<sub>f</sub>=</b> 4
0,011584948	0,77814524



$$y = 0,1379x - 0,5445$$

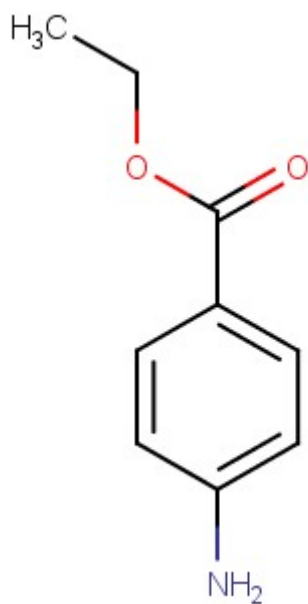
$$r^2 = 0,014669501$$

$$r = \sqrt{0,014669501}$$

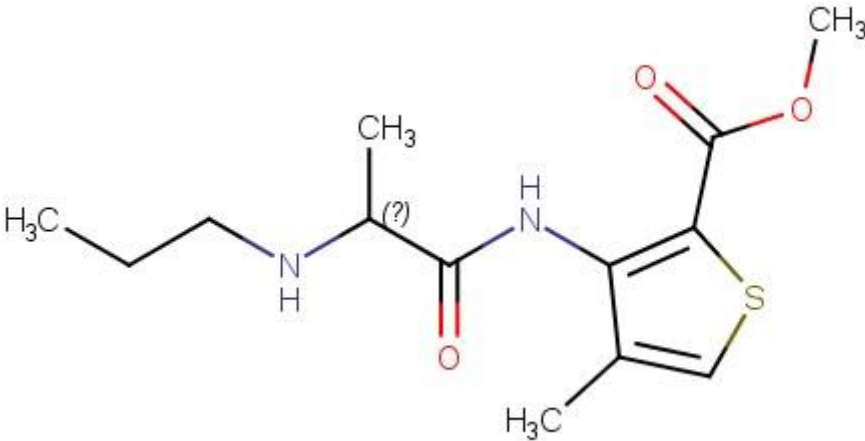
$$r = 0,121117716$$

$$r < 0,6$$

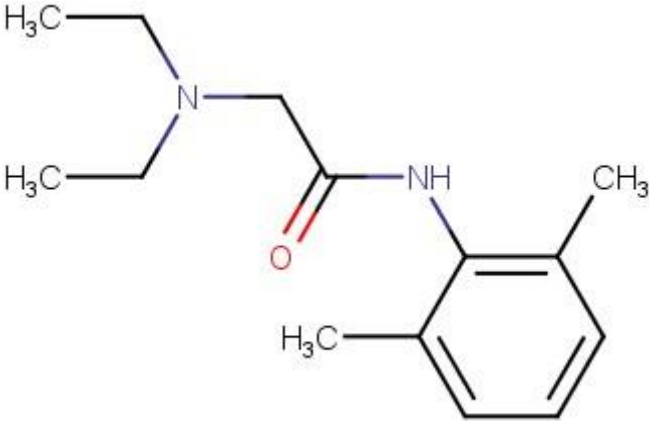
Neprokázaná korelace, nelze zjistit hodnotu pro pentyl-4-aminobenzoát.



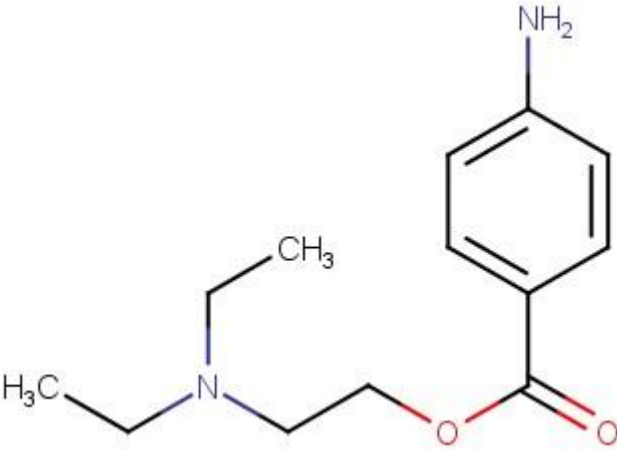
benzokain



articain

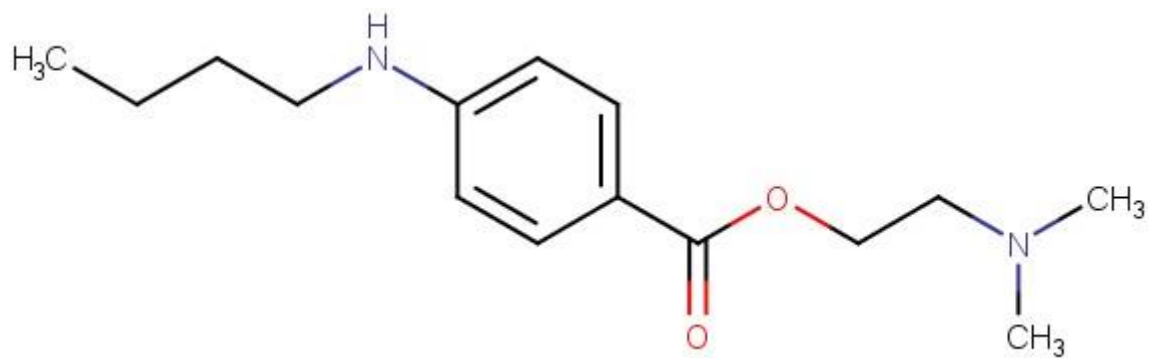


lidokain

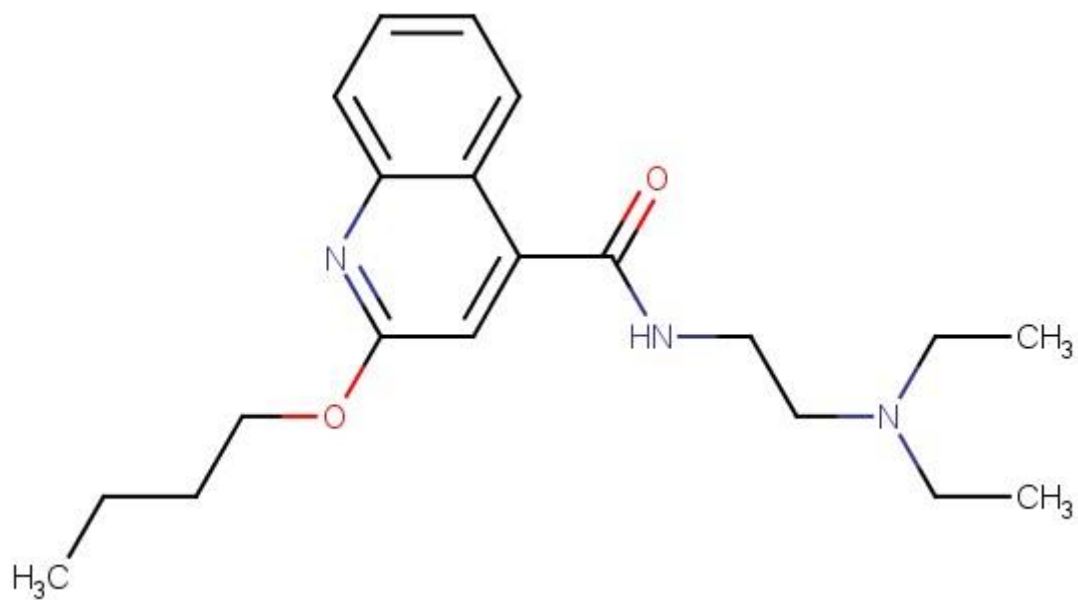


prokain

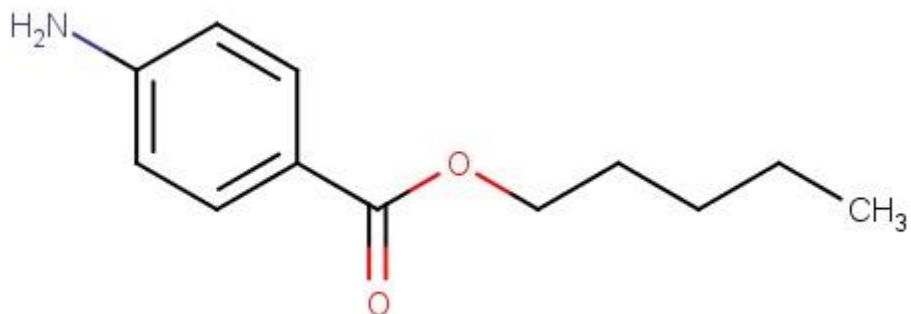
Michaela Králová



tetrakain



cinchokain



pentyl-4-aminobenzoát