

عنوان مقاله:

مطالعه QSPR فاکتور بازداری برخی از ترکیبات آلی در کروماتوگرافی مایع فاز معکوس

محل انتشار:

همایش ملی یافته های نوین شیمی در صنعت پزشکی (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

محمدحسین فاطمی - دانشیار - شیمی تجزیه گرایش کمومتریکس

سیده مریم صادقی - دانشجوی کارشناسی ارشد، شیمی تجزیه، گرایش کمومتریکس

خلاصه مقاله:

هدف اصلی مطالعه روابط کمی ساختار - خصوصیت (QSPR) بوسیله رگرسیون خطی چندگانه برای پیش بینی رفتار بازداری محلولها بر پایه ساختارشان بر روی برخی از مشتقات بنزن در کروماتوگرافی مایع فاز معکوس می باشد. داده های بازداری شامل 186 مولکول در هرسری می باشد و مدلسازی روی 5 فاز ساکن (M-C18e, M-PURE, Sym-C18, Sym-C8, M-C8) و 2 فاز متحرک (استونیتریل و آب، متانول و آب) در 6 نسبت مولی متفاوت انجام گرفت. برای این کار مولکولها به دو دسته سری آموزشی و سری پیش بینی تقسیم شدند و توصیف کننده های الکترونی، توپولوژی، هندسی و کوانتوم- شیمیایی برای تمام مولکولها محاسبه شدند. به وسیله تکنیکهای انتخاب متغیر مرحله ای، توصیف کننده های مهمتر انتخاب و سپس به کمک روشهای رگرسیون خطی چندتایی بین این توصیف کننده ها و فاکتور بازداری مدلسازی انجام شد. توصیف کننده های انتخاب شده در این مدلها DDxD C18DHOMO، HACAD Inp و R2p بودند. مقدار ریشه متوسط مربعات خطا (RMSE)، انحراف استاندارد R و به ترتیب 0/154، 0/156 و 0/953 می باشند که نتایج آماری بدست آمده برای یکی از حالتها مورد بررسی در این مقاله است و بیانگر این می باشد که روش رگرسیون خطی چند گانه برای پیش بینی رفتار بازداری این دسته از ترکیبات روش مناسبی می باشد.

کلمات کلیدی:

روابط کمی ساختار- خصوصیت - رگرسیون خطی چندتایی- کروماتوگرافی مایع فاز معکوس

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/70965>

