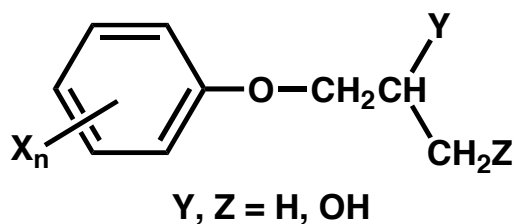


試験問題 (2006 年)

以下の化合物の、ある種のカビに対する生育阻害活性 ($\log 1/C$: 大きいほど高活性) について classical QSAR 解析を行ったところ、Y および Z が H であるか OH であるかに関係なく、 X_n 置換基のパラメーターを用いて以下の式が得られました。式に含まれるそれぞれのパラメーター ($\log P$, E_s , σ) について、その定義を述べなさい。また、この式からどのような化合物が高活性を持つと考えられるか説明しなさい。

但し、 X_n は多置換体を含むことを意味し、 $E_s(\text{ortho})$ は、 $-\text{OCH}_2\text{CH}(\text{Y})(\text{CH}_2\text{Z})$ 置換基の 2-, 6-, あるいは 2,6-位に置換基が存在する場合、それらの E_s (の和) を表し、 $\Sigma\sigma$ は多置換体の場合、すべての置換基の σ 値の総和を表します。n, s, r はそれぞれ、化合物数、標準偏差、相関係数です。



$$\log 1/C = 0.75 \log P + 0.20 E_s(\text{ortho}) + 0.35 \Sigma\sigma + 1.29$$

$$n = 28 \quad s = 0.16 \quad r^2 = 0.91$$

Biobite 社, QSAR Bio Database 2529 を参考.

—