

# Hansch Analizleri

## >> Hansch Analiz Modelinin Tanımı

$$\log 1/C = k_1 \pi + k_2 \sigma + k_3 E_s + k_0$$

KİMYASAL BİLEŞİĞİN  
ORGANİZMADAKİ  
TRANSPORTU VE  
HEDEF İLE  
**HİDROFOBİK**  
ETKİLEŞMELERİNİ  
TANIMLAR

KİMYASAL BİLEŞİĞİN  
HEDEF İLE  
**ELEKTRONİK** VE  
POLAR  
ETKİLEŞMELERİNİ  
TANIMLAR

KİMYASAL BİLEŞİĞİN  
HEDEF İLE  
KONFORMASYONEL  
UYUMUNU VE  
**STERİK** ETKİLEŞMELERİNİ  
TANIMLAR

$\log 1/C$   
BİLEŞİĞİN [C = KİMYASAL  
KONSANTRASYON MOLAR  
AKTİVİTE ŞEKLİNDE  
BİYOLOJİK ETKİ GÖSTEREN]  
LOGARİTMA DEĞERLERİ. TERS

# Hansch Analizleri

## >> İstatistiksel Verilerin Tanımı

### HANSCH ANALİZİ DENKLEMİNİN İSTATİSTİKSEL YÖNDEN TANIMI

**n**: REGRESYON ANALİZİNDE YER ALAN BİLEŞİKLERİN (OBJELERİN) SAYISI

**r** veya **R**: KORELASYON KATSAYISI  
(Goodness of Fit)

**r<sup>2</sup>** veya **R<sup>2</sup>**: KORELASYON KATSAYISI KARESİ  
(Uyumun yüzde oranını gösteren ölçüt)

**s** : STANDARD HATA ORANI

**F**: (FISHER TESTİ DEĞERİ) HESAPLANAN KORELASYON DENKLEMİNİN %95 VEYA %99 OLASILIK LİMİTLERİ İÇERİSİNDE İSTATİSTİKSEL YÖNDEN NE KADAR UYUMLU OLDUĞUNU GÖSTEREN ÖLÇÜT

**DF**: MODELİN SERBESTLİK DERECESİ (  $DF = n - k - 1$  )

BAĞIMLI DEĞİŞKEN

BAĞIMSIZ DEĞİŞKENLER

$$\log 1/C = k_1 \log P + k_2 \sigma + k_3 E_s + k_0$$

KORELASYON SABİTESİ

REGRESYON KATSAYILARI

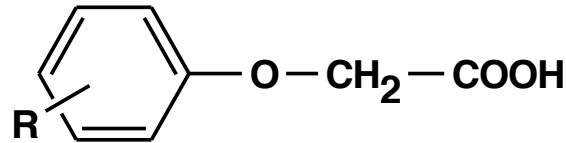
$$n=24, R^2=0.953, s=0.021, F=89.52, DF=20$$

İSTATİSTİKSEL VERİLER

## İLK ÇOK PARAMETRELİ QSAR ANALİZİ

**HANSCH, C.**, MALONEY, P.P., **FUJİTA, T.** and MUIR, R.M.,  
*Nature* (London), 194, 178 (1962).

ROBERT MUIR'in (Botanikçi, Iowa Üniversitesi, Iowa) ARAŞTIRDIĞI, 3 veya 4 Sübstitüe FENOKSİASETİK ASİT TÜREVİ BİLEŞİKLERİN BİTKİ BÜYÜMESİNİ REGÜLE EDEN AKTİVİTELERİ ÜZERİNE GERÇEKLEŞTİRİLEN QSAR ÇALIŞMASIDIR.



$$\log 1/C = - 2.14 \pi^2 + 4.08 \pi + 2.78 \sigma + 3.36$$

# Hansch Analizleri

## >> Korelasyon Denklemi Seçimi Örneklemesi

**A**  $\text{Log } 1/C = 1.67(\pm 0.65)\pi - 1.53(\pm 0.23)\sigma + 2.28 (\pm 1.08)L + 0.87(\pm 0.06)B_4 + 3.65$

$n=14, R^2=0.923, s=0.022, F=38.91 (F_{1,4,0.05}=3.6)$

**B**  $\text{Log } 1/C = 1.27(\pm 0.56)\log P + 1.67(\pm 0.58)\pi + 0.82 (\pm 0.88)\sigma + 2.27$

$n=18, R^2=0.961, s=0.032, F=22.19 (F_{1,3,0.05}=3.4)$

**C**  $\text{Log } 1/C = 1.53(\pm 0.62)\pi + 0.53(\pm 0.74)R + 0.41(\pm 0.82)E_s + 1.89$

$n=20, R^2=0.973, s=0.221, F=02.52 (F_{1,3,0.05}=3.3)$

**D**  $\text{Log } 1/C = 1.27(\pm 0.26)\log P + 1.67(\pm 0.38)L + 0.82 (\pm 0.04)\sigma + 2.27$

$n=24, R^2=0.951, s=0.022, F=26.91 (F_{1,3,0.05}=3.1)$