

データ解析に基づく TLC 分析におけるフェノール類の R_f 値の予測

(同志社大生命) ○中村 祐土・渡部 瑞綺・太田 哲男・大江 洋平

Prediction of R_f Values for Phenols in TLC Analysis on the Basis of Data Analysis (*Faculty of Life and Medical Sciences, Doshisha University*) ○Yushi Nakamura, Mizuki Watabe, Tetsuo Ohta, Yohei Oe

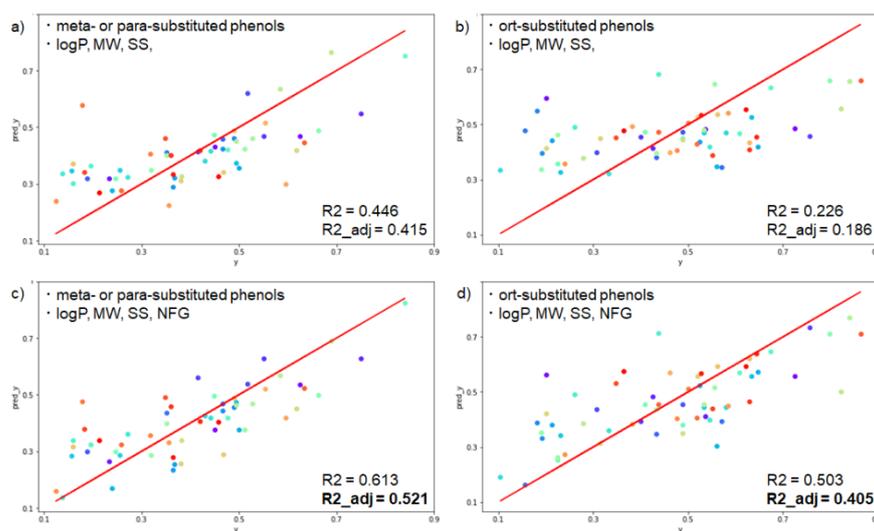
TLC (Thin-Layer Chromatography) analysis is an analytical method widely used from identification of compounds to observation of reaction processes. In this study, we researched the prediction of the R_f values of phenols as an initial study. As a result of various studies, we found that the introduction of number of functional groups of phenols to an explanatory variable gave better regression models than without those. In this poster presentation, we will discuss the details including the effects of variables based on Hammett rule and pKa.

Keywords : Chemoinformatics, Chromatography, TLC, Phenols

TLC (Thin-Layer Chromatography) 分析は、化合物の同定から反応経過の観察まで幅広く利用される分析操作である。¹⁾ 少量のサンプルから簡便に分離分析可能な優れた手法であるが、その解析には熟練した化学的な知識が求められる。本研究では、初期検討としてフェノール類をターゲットとした R_f 値の予測を目的とし、予測に必要なパラメータの探索・創出とそれらを利用した回帰分析による予測について検討した。

様々な検討の結果、メタ・パラ位に置換基を有するフェノール類とオルト位に置換基を有するフェノール類に対して、説明変数として logP、MW、SS (溶媒強度) に加えて、各フェノールの官能基保有数 (Number of Functional Groups、以下 NFG) を用いて回帰分析することで、用いない場合に比べて精度の良い R_f 値の予測モデルが得られることを見出した (右図 (直線は理想的なプロットの位置を示す)、

メタ・パラ : a) vs c)、オルト : b) vs d))。本ポスター発表では、ハメット則や pKa に基づいた変数の効果等も含めてその詳細について報告する。



1) A. A. Bele, A. Khale, *Int. J. Pharm. Sci. Res.* **2011**, 2, 256-267.