

P-30

## AMINE화합물 및 NITRO화합물에 대한 QSAR 연구

김재현, 김애경

동덕여자대학교 보건관리학과 : 136-714 서울시 성북구 월곡동 23-1

수많은 화학물질들의 발견과 제조는 인류의 과학을 발달시켜왔으나, 또한 환경오염 및 인간의 건강을 위협하여왔다. 환경오염의 심각성이 날로 더해가는 오늘날에 있어서 화학물질의 분자 구조와 생물학적 활성 사이의 관계를 추정하는 화학물질로 인한 환경오염 및 인간 건강의 위협으로부터 환경보호와 건강보호로 나아가려는데에 중요한 의의를 갖는다.

따라서, 본 연구에서는 작은 연구로 amine 및 nitro 화합물들의 chem-physico parameter 들을 살펴보고 각 compound들의 LD50값과의 상관관계를 분석해봄으로써, 물리적 화학적 성질들이 서로 어떤 상관관계를 가지며, 각 화합물의 독성과는 어떤 상관관계가 있는지를 살펴보았다. 본 연구에서는 amine기와 nitro기를 가진 화합물들을 중심으로 다음과 같은 parameter들을 계산하였으며,

1) Molecular Volume 2) I/O character 3) Molecular Connectivity 4) Molecular Surface Area 5) Molecular negentropy 6) Sloivity 7) Koc 8) Kow 9) Bioconcentration Factor 10) Molecular weight 11) LD50

LD50값은 문헌조사를 통하여 같은 실험에 의한 기존의 data 값을 이용하였다.

통계방법으로는 SAS를 이용한 단순회귀분석을 하였다.

구두발표 ( ) 포스터 발표(○)

[책임연구자]

성명 : 김재현

주소 : 서울시 성북구 월곡동 23-1 동덕여자대학교 보건관리학과

전화번호 : 02) 940-4484

FAX No : 02) 940-4193