

**S FOR A SET OF N-(DIMETHYL-  
IZAMIDE HYDROCHLORIDES.**

hetti(b); Márcia Galleggi(b) and

ituto de Química, Universidade  
epto. de Farmacologia, Instituto  
lista; Botucatu, SP, Brazil.  
SP - BRAZIL.

set of 2-(dimethylamino)ethyl-  
id to procaine, showed that their  
parent partition coefficient(1,2).  
ble to hydrolysis, in the present  
is, with one methylene group in  
signed and was submitted to a  
ave been prepared by methods

the analysis were: lipophilicity,  
ly: Papp, the 1-octanol/water  
lar refractivity(4); and,  $\delta_{13C=O}$ .  
oup,  $\nu_{C=O}$ , the carbonyl infrared  
constants(4). LD<sub>50</sub>, the lethal  
s the biological parameter. Thus  
ges could explain the observed  
was performed. A positive  
lethal toxicity, expressed by

$$(2,454 \pm 0,058) \quad \text{eq.1} \\ 39,14 \quad (p)=0,00024$$

z/, QSAR: Rational Approaches to  
9-512 (1991).  
l. et al., Trends in QSAR: and  
1992).  
7), 831-832 (1983).  
, 165-195 (1991).

**ALGORITMO DE ANÁLISIS DE CLUSTER APLICADO A  
EL PLANEAMIENTO DE FARMACO** Maria da Paz do  
Nascimento Moreno, Nelson O. Moreno, Sócrates C. H.  
Cavalcanti, Hélio M. de O. Magalhães e Antonio J. Alves  
Departamento de Farmácia, Universidade Federal de  
Pernambuco

50740-520 Recife, Pernambuco, Brasil

El algoritmo representa un método de clasificación Jerárquico modificado que tiene como objetivo agrupar los individuos mas homogenios de una serie. El modelo propuesto, en el qual el algoritmo se basea, tiene como objetivo prever los tipos de sustituentes que se puede introducir en la molécula organica para propiciar una mayor actividad biológica y realiza estudios usando la relación estructura-actividad. Inicialmente los sustituentes que se van a introducir en el prototipo de molécula son seleccionados a través de un metodo de clasificación Jerárquico modificado. El algoritmo desarrolla los pasos siguientes: 1-Obtención de los parametros normalizados. 2-Obtención de la matriz de distancias y de la distancia admisible. 3-Obtención de los vecinos. 4-Agrupamientos ordenados. 5-Reducción total del árbol, agrupando los sustituentes mas próximos, formando pseudo-sustituentes . 6-Analisis de la actividad de las ramas con base en las ecuaciones de QSAR. El algoritmo se realizo en lenguaje Pascal version 7.0. Esta técnica se aplica cuando hay un grande número de posibles sustituentes por sitios. Se construye un árbol de agrupamiento para cada sitio de sustitución de la molécula, despues se escoje un camino en el árbol que conduce provablemente a los compuestos mas activos. El algoritmo fue empleado en algunas series produciendo resultados compatibles con los experimentales.

Apoio financeiro: CNPq, CAPES e FACEPE