

**ПРОГНОЗ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ
РАСТВОРИМОСТИ НИТРОАРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С
ПОМОЩЬЮ QSPR – МЕТОДОЛОГИИ**

**Огниченко Л.Н.¹, Полищук П.Г.¹, Артеменко А.Г.¹, Клименко К.А.²,
Кузьмин В.Е.¹, Горб Л.Г.³**

¹*Физико-химический институт им. А.В. Богатского НАН Украины, Украина, Одесса, 65080, Люстдорфская дорога 86, e-mail: ogni@ukr.net*

²*Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова, Украина, Одесса, ул. Дворянская 2*

³*Лаборатория вычислительной структурной биологии, отдел молекулярной биофизики, институт молекулярной биологии и генетики НАН Украины, Украина, Киев, 03143, ул. Заболотного 150, e-mail: lgorb@icnanotox.org*

Растворимость органических веществ в воде является важным свойством, играющим огромную роль в их поведении во многих процессах при изучении самых разнообразных явлений. Среди них процессы абсорбции и транспорта лекарственных средств в живых организмах, коррозия металлов, вымывание загрязняющих примесей и их воздействие на земную экосистему, отложение минералов и т.д.

Поскольку растворимость жидких и твёрдых веществ зависит от температуры, в данной работе сделана попытка спрогнозировать такую зависимость с помощью QSPR методологии. Данные по растворимости в воде при различных температурах для исследуемых нитроароматических соединений были взяты из книги Handbook of aqueous solubility data (S. Yalkowsky, Y. He, 2003). Расчет структурных дескрипторов исследуемых молекул проводился в рамках 2D-QSPR подхода на основе симплексного представления молекулярной структуры. Вершины в симплексах были дифференцированы по типам атомов, липофильности, частичному заряду на атоме, рефракции и способности образовывать водородные связи.

Для построения QSPR моделей были использованы методы PLS и Random Forest. Получены адекватные модели, характеризующиеся высокими статистическими характеристиками и описывающие влияние структуры исследуемых молекул на растворимость при различных значениях температуры. Кроме того, построена модель, которая прямо включает температуру как параметр.