

- 69 November 1998 Release.
<http://webbook.nist.gov/chemistry/>
8. He L., Jurs P.C. Assessing the reliability of a QSAR model's predictions // Journal of Molecular Graphics and Modelling. 2005. Vol. 23. P. 503-523.
9. Важев В.В. Использование ИК - и масс-спектров в QSAR/QSPR – исследованиях. – Костанай: КГУ, 2003. - 114 с.

Важев В.В., доктор химических наук

Важева Н.В., кандидат педагогических наук

Калина Е.В., магистрант

Костанайский государственный педагогический институт

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КОНСТАНТ ДИССОЦИАЦИИ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ ПО ИХ ИК СПЕКТРАМ

Карбоновые кислоты, их производные, а также многочисленные соединения, содержащие наряду с карбоксильной и другие функциональные группы (например, аминокислоты, оксикислоты и др.), имеют большое биологическое значение и находят разнообразное практическое применение. К числу важнейших характеристик карбоновых кислот относятся константы диссоциации, используемые для оценки реакционной способности веществ, расчёта кислотно-основных равновесий в многокомпонентных системах в фармакологии и фармацевтической химии, токсикологии, экологии. Обычно за меру константы диссоциации принимают ее обратный логарифм рК. Существующие справочные данные значений рК не превышают нескольких тысяч ввиду трудоемкости их экспериментального определения, что побуждает разрабатывать расчетные методы оценки и прогнозирования рК. Одним из перспективных направлений численной оценки является QSPR (Quantitative Structure- Property Relationships) подход, устанавливающий корреляции свойства с дескрипторами молекулярной структуры.

В недавней работе [1] представлены линейные модели показателя кислотности рК для алифатических карбоновых кислот и для спиртов, построенные с помощью наборов эм-

пирических атомных дескрипторов. Для модели рК 1122 алифатических карбоновых кислот коэффициент корреляции R между экспериментальными и расчетными значениями был равен 0,902, стандартное отклонение $s = 0,423$; для модели рК 288 спиртов коэффициент корреляции – 0,904, стандартное отклонение 0,755. Оценка рК карбоновых кислот, анилинов и фенолов с использованием квантовых топологических молекулярных дескрипторов выполнена в [2]. Коэффициенты корреляции составили: 0,959 (кислоты), 0,987 (анилины), и 0,976 (фенолы). Ксанг и др. [3] использовали набор из 625 кислот и 412 оснований. Полученные модели имеют $s = 0,41$ для кислот и 0,30 для оснований. В работе [4] с привлечением квантово-химических дескрипторов выполнена оценка рК фенолов, карбоновых кислот и спиртов. Коэффициенты корреляции составили 0,96 для фенолов; 0,84 для неароматических карбоновых кислот; 0,89 для бензойных кислот и 0,89 для спиртов. В статье [5] сообщено о результатах моделирования рК для 16 алифатических карбоновых кислот с $R = 0,97$, $s = 0,24$.

Нами рассмотрена возможность использования ИК спектров карбоновых кислот в качестве дескрипторов при оценке значений рК. Был взят набор из 58 предельных и непредельных карбоновых кислот, принадлежащих к

алифатическому, алициклическому, ароматическому рядам. Показатели рК получены с сайта базы данных PhysProp [6], ИК спектры веществ в газовой фазе взяты на сервере NIST (США) [7]. Тренировочная выборка состояла из 40, а контрольная- из 18 веществ. Расчеты выполнены с помо-

щью разработанной нами компьютерной программы PROGROC (Program RObustness Calculation) [8], там же приведены способы нормировки спектров. Результаты прогнозирования рК приведены в таблицах 1,2 и на рисунке 1. Названия веществ приводятся в соответствии с принятыми в [7].

**Экспериментальные [6] и рассчитанные по ИК спектрам значения рК
CAS- регистрационный номер по Chemical Abstracts**

Таблица 1

№	Соединение	CAS	Экспер	Расч	Разность
1	2	3	4	5	6
1	Nonanedioic acid	123-99-9	4.55	4.87	-0.32
2	2-Biphenylcarboxylic acid	947-84-2	4.31	4.34	-0.03
3	(p-Methoxyphenoxy)acetic acid	1877-75-4	3.21	3.22	-0.01
4	Pentanoic acid, 4-охо-	123-76-2	4.64	4.48	0.16
5	Propanoic acid	79-09-4	4.88	5.07	-0.19
6	2,3-Dimethoxybenzoic acid	1521-38-6	3.98	3.98	-0.00
7	1-Naphthalenecarboxylic acid	86-55-5	3.60	3.57	0.03
8	2-Naphthalenecarboxylic acid	93-09-4	4.17	4.21	-0.04
9	2-Propenoic acid, 3-phenyl-	621-82-9	4.44	4.40	0.04
10	Decanoic acid	334-48-5	4.90	5.04	-0.14
11	Cyclohexanecarboxylic acid	98-89-5	4.90	4.83	0.07
12	Benzoic acid, 2-methyl-	118-90-1	3.98	3.93	0.05
13	Cyclohexaneacetic acid	5292-21-7	4.80	4.69	0.11
14	Benzenepropanoic acid	501-52-0	4.66	4.62	0.04
15	2-Propenoic acid, 2-methyl-	79-41-4	4.65	4.65	0.00
16	3,5-Dimethylbenzoic acid	499-06-9	4.54	4.50	0.04
17	p-Methylcinnamic acid	1866-39-3	3.21	3.20	0.01
18	3-Methylphenoxyacetic acid	1643-15-8	3.20	3.10	0.10
19	Benzeneacetic acid	103-82-2	4.31	4.36	-0.05
20	3-Methylcinnamic acid	3029-79-6	4.21	4.31	-0.10
21	2-Naphthylacetic acid	581-96-4	4.30	4.30	0.00
22	Butanoic acid, 3-methyl-	503-74-2	4.77	4.58	0.19
23	3-Methoxyphenoxyacetic acid	2088-24-6	3.14	3.14	0.00
24	2-Hydroxy-3-methylbenzoic acid	83-40-9	2.95	2.95	0.00
25	4-Ethylbenzoic acid	619-64-7	4.35	4.35	-0.00
26	p-Tolueneacetic acid	622-47-9	4.37	4.37	0.00
27	.alpha.-Methylcinnamic acid	1199-77-5	4.17	4.20	-0.03
28	Benzoic acid, 3-methoxy-	586-38-9	4.09	4.15	-0.06
29	Benzeneacetic acid, .alpha.-methyl-	492-37-5	4.90	4.81	0.09
30	Butanoic acid, 2-ethyl-	88-09-5	4.71	5.00	-0.29
31	p-Propoxybenzoic acid	5438-19-7	4.78	4.77	0.01
32	Salicylic Acid	69-72-7	2.97	3.00	-0.03
33	2,2-Dimethylvaleric acid	1185-39-3	5.02	4.68	0.34
34	Butanedioic acid	110-15-6	4.21	4.18	0.03
35	Butanedioic acid, methyl-	498-21-5	3.17	3.20	-0.03
36	Propanoic acid, 2-methyl-	79-31-2	4.84	4.60	0.24

37	Benzoic acid, 4-hydroxy-	99-96-7	4.54	4.57	-0.03
38	Propanoic acid, 2,2-dimethyl-	75-98-9	3.14	3.44	-0.30
39	2-Propenoic acid	79-10-7	4.26	4.22	0.04
40	Acetic acid	64-19-7	4.76	4.71	0.05
41	Pentanoic acid, 4-methyl-	646-07-1	4.84	4.97	-0.13
42	4-Methylphenoxyacetic acid	940-64-7	3.21	2.91	0.30
43	2,3-Dimethylbenzoic acid	603-79-2	3.72	3.62	0.10
44	Benzoic acid, 3-hydroxy-	99-06-9	4.30	4.35	-0.05
45	2,6-Dimethylbenzoic acid	632-46-2	3.35	3.13	0.22
46	Octanoic Acid	124-07-2	4.89	4.76	0.13
47	Butanoic acid, 2-methyl-	116-53-0	4.81	4.55	0.26
48	Butanoic acid	107-92-6	4.82	4.88	-0.06
49	Heptanoic acid	111-14-8	4.80	4.93	-0.13
50	2-Methoxyphenoxyacetic acid	1878-85-9	3.23	3.01	0.22
51	4-Phenylbutyric acid	1821-12-1	4.76	4.95	-0.19
52	Nonanoic acid	112-05-0	4.95	4.84	0.11
53	Hexanedioic acid	124-04-9	4.44	4.49	-0.05
54	5-Phenylvaleric acid	2270-20-4	4.90	4.98	-0.08
55	2-Acetylbenzoic acid	577-56-0	4.13	4.02	0.11
56	Acetic acid, phenoxy-	122-59-8	3.17	3.01	0.16
57	Hexanoic acid	142-62-1	4.88	4.94	-0.06
58	Octanedioic acid	505-48-6	4.52	4.15	0.37

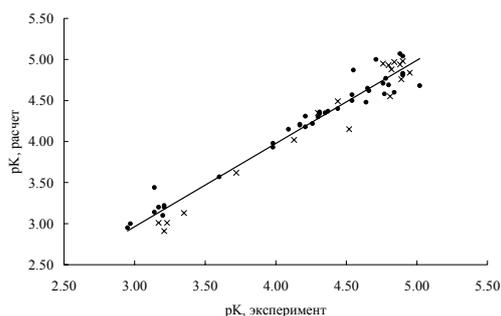


Рисунок 1. Корреляция между экспериментальными и вычисленными значениями рК

- – тренировочная выборка;
- ×- контрольная выборка

Приведенная на рисунке 2 гистограмма распределения частот ошибок прогнозирования рК близка к нормальному распределению.

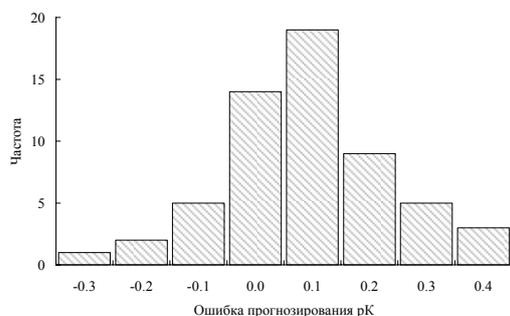


Рисунок 2. Гистограмма распределения частот ошибок прогнозирования рК

Показатели корреляции между экспериментальными и вычисленными значениями рК

Таблица 2

Показатели корреляции	Весь набор	Тренировочная выборка	Контрольная выборка
R	0,9765	0,9792	0,9834
s	0,14	0,13	0,15

Данные таблицы 2 убедительно демонстрируют высокий потенциал использования ИК спектров для оценки констант диссоциации органических соединений.

ЛИТЕРАТУРА

- Zhang J., Kleinöder T., Gasteiger J. Prediction of pK(a) Values for Aliphatic Carboxylic Acids and Alcohols with Empirical Atomic Charge Descriptors // J. Chem Inf. Model. – 2006. - Vol. 46, № 6. P. 2256-2266.
- Chaudry U.A, Popelier P.L. Estimation of pKa using quantum topological molecular similarity descriptors: application to carboxylic acids, anilines and phenols // J. Org. Chem. – 2004. – Vol. 69, № 2. P. 233-41.

- Xing L., Glen R.C., Clark R.D. Predicting pKa by Molecular Tree Structured Fingerprints and PLS // J. Chem. Inf. Comput. Sci. – 2003. – Vol. 43, № 3. P. 870 -879.
- Citra M.J. Estimating the pKa of phenols, carboxylic acids and alcohols from semi-empirical quantum chemical methods // Chemosphere. – 1999. – Vol 38, № 1. P. 191-206.
- Schürmann G., Cossi M., Barone V., Tomasi J. Prediction of the pKa of Carboxylic Acids Using the ab Initio Continuum-Solvation Model // J. Phys. Chem. A. – 1998. – Vol. 102, № 33. P. 6706 -6712.
- UW-Madison Chemistry Library. PHYSICAL & CHEMICAL PROPERTIES: O-P. Режим доступа: <http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm>
- NIST Chemistry WebBook. NIST Standard Reference Database Number 69 - November 1998 Release. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- Важев В.В. Использование ИК- и масс-спектров в QSAR/QSPR- исследованиях.- Костанай: КГУ, 2003. - 114 с.

Кариева М.В., магистрант
Жалкевич В.Т., доцент
КГУ им.А.Байтурсынова

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЛОГИКО-СМЫСЛОВЫХ МОДЕЛЕЙ ПРИ ОБУЧЕНИИ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Переход общества к качественно новому состоянию влияет на цели обучения. Требуются люди убежденные, активные, ищущие, умеющие жить и работать в условиях демократии, в обстановке возрастающей экономической и социальной ответственности за себя и свою страну. Поэтому первоочередными целями обучения становятся развитие способов умственных действий, формирование самостоятельности и творчества, усвоение знаний, умений и навыков.

В связи с этими целями большое значение играет развивающее обучение. Если при традиционном обучении (информационном, сообщающем) деятельность учащихся носит репродуктивный характер – воспроизведение, выполнение заданий по образцу, по определенному алгоритму, то в условиях развивающего обучения эта деятельность становится продуктивной. Учащийся самостоятельно ищет решение нового для него задания, проблемы, то есть он учится применять знания в новой ситуации и самостоятельно разрабатывать алго-

ритм решения стоящей перед ним проблемы.

Существует достаточно много методов развивающего обучения. Большинство из них применяются на протяжении многих лет. Но одним из новых и перспективных методов является использование логико-смысловых моделей [1].

Особенно важное значение этот метод приобретает при изучении химии, как одного из сложных предметов.

Понятие «логико-смысловая модель» было введено В.Э. Штейнбергом для представления знаний в виде многомерной модели, состоящей из двух компонентов: содержательного (смысловые элементы) и логического (порядок расположения смысловых элементов). Использование логико-смысловых моделей может значительно повысить эффективность обучения, позволит учесть тип познавательной деятельности учащихся (право- и левополушарные). Особенно эффективно использовать логико-смысловые модели для учащихся с правополушарным типом познавательной дея-