

Оценка канцерогенных свойств полициклических ароматических углеводов по спектроскопическим и топологическим дескрипторам

© Паймурзина Наталья Халитовна,²⁺ Ковалева Элла Александровна,²
Доломатов Михаил Юрьевич^{1,2*}

¹ Физико-технический институт. Башкирский государственный университет.
ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: +7 (965) 934-67-40. E-mail: paimurzina@inbox.ru

² Уфимский государственный нефтяной технический университет.
ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: пери- и ката-конденсированные полициклические ароматические углеводороды, канцерогенность, эквивалент токсичности, индекс Винера, спектроскопический дескриптор.

Аннотация

В работе изучены пери- и ката-конденсированные ПАУ, характеризующие антропогенное воздействие на окружающую среду. Особую опасность этот класс веществ представляет потому, что все ПАУ устойчивы в окружающей среде, обладают канцерогенным, мутагенным, тератогенным и гепатотоксическим действием. В данной статье авторами предложена дескрипторная модель, в которой в качестве параметров, определяющих эквивалент токсичности, используются расчетные и экспериментально определенные векторные числовые величины – дескрипторы. В работе приведены эквиваленты токсичности ПАУ (основанные на канцерогенности) и классификация канцерогенности согласно данным агентства по охране окружающей среды США. Получены спектры поглощения ПАУ, которые регистрировались в химически чистых растворах на модифицированном спектрофотометре *СФ-2000* с расширенным интерфейсом в диапазоне от 200 до 750 нм. На их основе рассчитан спектроскопический дескриптор (относительный эмпирический автокорреляционный μ -параметр). На основе описания структурной формулы молекулы с помощью молекулярного графа, который представляет собой двумерное отображение молекулы (вершины соответствуют атомам, а ребра – химическим связям молекулы) рассчитан топологический индекс Винера. В рамках предположения зависимости канцерогенных свойств ПАУ от структурно-топологических и спектроскопических характеристик авторы разработали математическую модель для оценки прогнозирования канцерогенных свойств ПАУ. Модель представляет собой двухфакторную множественную линейную регрессию. Коэффициенты уравнения регрессии найдены методом наименьших квадратов. Значимость коэффициентов определена по *t*-тесту. Адекватность построенной модели проверена по критерию Фишера. В результате проведенного анализа можно говорить о приемлемости модели и рекомендовать её для оценки прогнозирования канцерогенных свойств полициклических ароматических углеводов и использования в производственном эколого-аналитическом контроле.

Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А., Доломатов М.Ю. Оценка канцерогенных свойств полициклических ароматических углеводов по спектроскопическим и топологическим дескрипторам. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.69. №2. С.1-6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-2-1.

или

Natalia H. Paymurzina, Ella A. Kovaleva, Mikhail Yu. Dolomatov. The evaluation of the carcinogenic properties of polycyclic aromatic carbohydrates according their spectroscopic and topological descriptors. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.69. No.2. P.1-6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-2-1. (Russian)