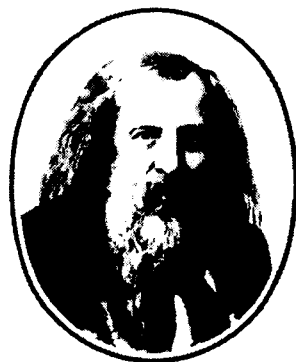


XVI



**МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД
ПО ОБЩЕЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ**

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

**ХИМИЧЕСКАЯ НАУКА:
ВАЖНЕЙШИЕ ДОСТИЖЕНИЯ
И ПЕРСПЕКТИВЫ**

ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ

ХИМИЯ И БИЗНЕС

**ИСТОРИЯ И ДОСТИЖЕНИЯ
ОТЕЧЕСТВЕННОЙ ХИМИИ**

Интеллектуальная система предсказания комплексообразующей способности новых лигандов

В. П. Соловьев, Н. Н. Страхова, В. П. Казаченко

Институт физиологически активных веществ РАН, Черноголовка

На основе (i) всестороннего экспериментального изучения термодинамических характеристик комплексообразования ($\lg K$, ΔG , ΔH , $T\Delta S$) макроциклических лигандов и их ациклических аналогов с катионами металлов и органическими катионами разнообразными методами, (ii) развития математических методов моделирования равновесий в растворах с использованием компьютерной техники и современных платформ программирования, (iii) разработки баз данных в области термодинамики комплексообразования на платформе передовых методов представления химических структур и (iv) исследования современных подходов по моделированию связи структура-свойство в системах катион металла — лиганд — растворитель — анион (M-L-S-A) создается интеллектуальная система предсказания комплексообразующей способности новых лигандов. Решаемой проблемой является оценка и предсказание равновесных констант устойчивости $\beta = [M_m L_n]/[M]^m [L]^n$ и изменений энтальпий ΔH реакции комплексообразования $mM + nL = M_m L_n$. Примечательным результатом в указанном направлении является то, что вполне удовлетворительное описание влияния растворителя на свободную энергию комплексообразования ΔG и логарифм константы устойчивости $\lg \beta$ получено с помощью единственного параметра ΔG_t° - стандартной энергии Гиббса переноса катиона металла из воды в данный растворитель. Влияние строения лиганда в рядах макроциклических соединений и их ациклических аналогов на величины $\lg \beta$ и ΔG удастся оценить на основе аддитивных и аддитивно-мультипликативных вкладов молекулярных фрагментов, которые представляют собой ближайшее, более дальнее атомное окружение каждого атома и атомно-связевые пути в молекуле между каждой парой атомов.