

**ỨNG DỤNG QSPR: SO SÁNH DỰ BÁO HẰNG SỐ BỀN CỦA
PHỨC THIOSEMICARBAZONE VỚI ION KIM LOẠI SỬ DỤNG MÔ HÌNH
HỒI QUY ĐA BIẾN, BÌNH PHƯƠNG TỐI THIỂU RIÊNG PHẦN VÀ HỒI QUY
THÀNH PHẦN CHÍNH CÙNG VỚI CÁC THAM SỐ MÔ TẢ PHÂN TỬ**

Nguyễn Minh Quang^{1,3}, Trần Xuân Mậu¹, Phạm Văn Tất*

¹Khoa Hóa học, Trường Đại học khoa học, Đại học Huế

²Khoa Khoa học và Kỹ thuật, Trường Đại học Hoa Sen

³Khoa Kỹ thuật Hóa học, Trường Đại học Công nghiệp Tp. Hồ Chí Minh

*Email: vantat@gmail.com

Ngày nhận bài: 28/8/2018; ngày hoàn thành phản biện: 26/9/2018; ngày duyệt đăng: 10/12/2018

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, các mô hình liên quan định lượng giữa cấu trúc và tính chất (QSPRs) của các phức chất thiosemicarbazone và ion kim loại được xây dựng dựa trên phương pháp hồi quy đa biến, bình phương tối thiểu riêng phần và hồi quy thành phần chính. Chất lượng các mô hình được đánh giá dựa vào các giá trị hệ số tương quan, sai số chuẩn trung bình và chuẩn Fisher. Kết quả nhận được mô hình QSPR_{MLR} với các giá trị $R^2_{train} = 0,908$; $R^2_{CV} = 0,850$; $Q^2_{test} = 0,8542$; $MSE = 0,852$; mô hình QSPR_{PLS} với $R^2_{train} = 0,908$; $R^2_{CV} = 0,888$; $Q^2_{test} = 0,8972$; $MSE = 0,661$; mô hình QSPR_{PCR} với $R^2_{train} = 0,914$; $R^2_{CV} = 0,948$; $Q^2_{test} = 0,8842$; $MSE = 0,827$. Các mô hình QSPR_{MLR}, QSPR_{PLS} và QSPR_{PCR} có khả năng dự đoán phù hợp với thực nghiệm.

Từ khóa: QSPR_{MLR}, QSPR_{PLS}, QSPR_{PCR}, hằng số bền, thiosemicarbazone.

APPLICATION OF QSPR: COMPARISON OF PREDICTION OF STABILITY CONSTANTS OF THIOSEMICARBAZONE COMPLEXES WITH METAL IONS USING MULTIVARIATE LINEAR REGRESSION, PARTIAL LEAST SQUARE, AND PRINCIPAL COMPONENT REGRESSION MODELS WITH MOLECULAR DESCRIPTIVE PARAMETERS

Nguyen Minh Quang^{1,3}, Tran Xuan Mau¹, Pham Van Tat^{2*}

¹ Faculty of Chemistry, University of Sciences, Hue University

² Faculty of Science and Technology, Hoa Sen University

³ Faculty of Chemical Engineering, Industry University of Ho Chi Minh City

* Email: vantat@gmail.com

ABSTRACT

In this study, the quantitative structure property relationships (QSPRs) of thiosemicarbazone complexes with metal ions were constructed based on multivariate linear regression, partial least square and principal component regression models. The quality of the models was evaluated based on coefficients of determination, mean standard error, and Fisher test. QSPR_{MLR} model had $R^2_{train} = 0,908$; $R^2_{CV} = 0,850$; $Q^2_{test} = 0,8542$; $MSE = 0,852$; QSPR_{PLS} model had $R^2_{train} = 0,908$; $R^2_{CV} = 0,888$; $Q^2_{test} = 0,8972$; $MSE = 0,661$; QSPR_{PCR} model had $R^2_{train} = 0,914$; $R^2_{CV} = 0,948$; $Q^2_{test} = 0,8842$; $MSE = 0,827$. These models could give a good prediction that agreed with the experiments.

Keywords: QSPR_{MLR}, QSPR_{PLS}, QSPR_{PCR}, stability constant, thiosemicarbazone.



Nguyễn Minh Quang sinh ngày 11/11/1977 tại Quảng Ngãi. Năm 2001, Ông tốt nghiệp ngành Công nghệ hóa học tại Trường Đại học Bách khoa Thành phố Hồ Chí Minh; tốt nghiệp thạc sĩ ngành Công nghệ hóa học năm 2007 tại Trường Đại học Bách khoa Thành phố Hồ Chí Minh. Năm 2016, ông là nghiên cứu sinh chuyên ngành Hóa lý và Hóa lý thuyết tại Trường Đại học Khoa học – Đại học Huế. Hiện nay, ông tham gia giảng dạy và nghiên cứu tại Trường Đại học Công nghiệp Thành phố Hồ Chí Minh.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa học tính toán lượng tử, mô hình hóa QSAR, QSPR và tổng hợp vật liệu đã được công bố trên các Tạp chí trong nước và Quốc tế.



Trần Xuân Mậu sinh ngày 6/5/1958 tại Hà Tĩnh. Ông tốt nghiệp kỹ sư ngành Công nghệ hóa học năm 1982 tại Trường Đại học Kỹ thuật Slovakia tại Bratislava (Slovakia) và bảo vệ luận án phó tiến sĩ cùng ngành tại cùng trường vào năm 1986.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa lý thuyết và hóa lý, Hóa học vật liệu.



Phạm Văn Tất sinh ngày 30/11/1966 tại Nam Định. Năm 1989 ông tốt nghiệp ngành Hóa học tại trường đại học Tổng hợp Hà Nội; tốt nghiệp Thạc sỹ ngành Hóa học Phân tích năm 2001 tại trường đại học Đà Lạt. Năm 2006 ông bảo vệ thành công luận án Tiến sĩ tại Viện Hóa lý và Hóa lý thuyết, trường đại học Cologne, Cộng hòa Liên bang Đức. Năm 2010 ông được nhà nước công nhận chức danh phó Giáo sư chuyên ngành Hóa lý và Hóa lý thuyết. Hiện nay là trưởng Bộ môn ngành Công nghệ Kỹ thuật Môi trường, trường đại học Hoa Sen.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa học tính toán lượng tử và Mô phỏng Monte Carlo các trạng thái cân bằng, Hóa học Phân tích, Hóa học Môi trường và Quản lý và Đánh giá chất lượng Môi trường bằng GIS, Viễn thám và Hệ thống Trí tuệ Nhân tạo.