

DESARROLLO DE MODELOS QSPR PARA ÍNDICES DE RETENCIÓN DE AROMAS MEDIDOS EN COLUMNAS DE DIFERENTE POLARIDAD

Cristian Rojas^{1,2,*}, Pablo R. Duchowicz^{1,*}, Piercosimo Tripaldi³ y Reinaldo Pis Diez⁴

¹ Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), CONICET, UNLP, Diag. 113 y 64, C.C. 16, Sucursal 4, 1900 La Plata, Argentina

² Decanato General de Investigaciones. Universidad del Azuay, Av. 24 de Mayo 7-77 y Hernán Malo. Apartado Postal 01.01.981. Cuenca, Ecuador

³ Laboratorio de Química-Física de Alimentos. Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del Azuay, Av. 24 de Mayo 7-77 y Hernán Malo. Apartado Postal 01.01.981. Cuenca, Ecuador

⁴ CEQUINOR, Centro de Química Inorgánica (CONICET, UNLP), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, C.C. 962, 1900 La Plata, Argentina

* Correspondencia: crojasvilla@gmail.com (CR) & pabloducho@gmail.com (PRD)

Resumen.

En este trabajo se presenta el desarrollo de modelos matemáticos basados en las relaciones cuantitativas estructura-propiedad (QSPRs) para modelar los índices de retención de compuestos aromáticos medidos en cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC-MS) en tres fases estacionarias de diferente polaridad [1]. Se utilizaron 269 aromas para la columna polar DB-225MS, 267 moléculas para la fase ligeramente polar HP5-MS y 262 compuestos para la columna no polar HP-1. En cada caso se realizó una partición en grupos de calibración, validación y predicción, basada en el método de subconjuntos balanceados (BSM) [2], de tal forma de obtener representatividad estructura-propiedad en los mismos. Posteriormente se calcularon 1819 descriptores moleculares [3] independientes de la conformación con el programa Dragon [4] y se usó el método de reemplazo (RM) [5,6] para seleccionar los descriptores más importantes. Durante el proceso de selección de descriptores, el grupo de calibración se usó para construir los modelos, mientras que el de validación se usó para validar los mismos y evitar sobreajustes. Finalmente, el grupo de predicción se usó para medir la capacidad predictiva de los modelos QSPR. Los mejores modelos para las tres fases estacionarias se obtienen con 5 descriptores: DB-225MS ($R^2_{\text{cal}} = 0.86$, $S_{\text{cal}} = 180.8$, $R^2_{\text{val}} = 0.84$, $S_{\text{val}} = 171.2$, $R^2_{\text{pred}} = 0.79$, $S_{\text{pred}} = 169$); HP5-MS ($R^2_{\text{cal}} = 0.96$, $S_{\text{cal}} = 64.2$, $R^2_{\text{val}} = 0.96$, $S_{\text{val}} = 63.1$, $R^2_{\text{pred}} = 0.95$, $S_{\text{pred}} = 56.1$) y HP-1 ($R^2_{\text{cal}} = 0.97$, $S_{\text{cal}} = 58.8$, $R^2_{\text{val}} = 0.95$, $S_{\text{val}} = 61$, $R^2_{\text{pred}} = 0.92$, $S_{\text{pred}} = 63.8$). Adicionalmente, cada modelo ha sido exhaustivamente validado utilizando diferentes criterios y se ha definido su dominio de aplicabilidad. Finalmente, se estableció el grado de contribución de los descriptores involucrados en cada modelo.

[1] Yan, J., Liu, X. B., Zhu, W. W., Zhong, X., Sun, Q., & Liang, Y. Z. (2015). *Chromatographia*, 78(1-2), 89-108.

[2] Rojas, C., Duchowicz, P. R., Tripaldi, P., & Diez, R. P. (2015). *Chemometr. Intell. Lab.*, 140, 126-132.

[3] Todeschini, R., & Consonni, V. (2009). *John Wiley & Sons*.

[4] Dragon (version 7). Software for Molecular Descriptor Calculation, *Kode, srl.*, (2016).

[5] Duchowicz, P. R., Castro, E. A., Fernández, F. M., & Gonzalez, M. P. (2005). *Chem. Phys. Lett.*, 412(4), 376-380.

[6] Duchowicz, P. R., Castro, E. A. & Fernández, F. M. (2006). *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 55, 179-192.