Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Хемоинформатика.

Подраздел: Координационная химия. Регистрационный код публикации: 11-27-16-15

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". http://butlerov.com/readings/ Поступила в редакцию 13 июля 2011 г. УДК 544.354.081.7:004.021.

Методы хемоинформатики в термодинамике равновесий. Монокоронаты калия $(18C6K^{+})$.

© Бондарев Сергей Николаевич, ¹ Зайцева Инна Сергеевна² и Бондарев Николай Васильевич 1*

¹ Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина. пл. Свободы, 4. г. Харьков, 61077. Украина. E-mail: n bondarev@ukr.net 2 Харьковская национальная академия городского хозяйства Ул. Маршала Бажанова, 17. г. Харьков, 61002. Украина. E-mail: inna.zaitseva123@yandex.ru

*Ведущий направление; *Поддерживающий переписку

Ключевые слова: хемоинформатика, искусственная нейронная сеть, множественная регрессия, массив данных, константа комплексообразования, 18-краун-6, энергия Гиббса, сольватация.

Аннотация

Множественная линейная регрессия и нейросетевое моделирование применены для анализа и прогнозирования энергии Гиббса (констант) устойчивости комплексов эфира 18-краун-6 с катионами калия в водно-органических растворителях. Проведено сопоставление результатов сольватационнотермодинамического и регрессионного анализа. Выявлены значимые факторы, влияющие на устойчивость короната калия. Построена нейросетевая модель (трехслойный персептрон) и показана перспетивность применения нейронных сетей для прогнозирования констант устойчивости монокоронатов калия в водно-органических растворителях.