

Программа с элементами искусственного интеллекта для оценки энтальпии образования радикалов по кинетическим данным

© Туманов* Владимир Евгеньевич, Прохоров⁺ Андрей Иванович
и Соловьева Майна Ефимовна

Институт проблем химической физики РАН. г. Черноголовка, 142432.
Московская обл. Россия. Факс: (496) 522-35-07. E-mail: tve@icp.ac.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: интеллектуальный программный агент, энтальпия образования радикала, энтальпия образования молекулы, модель пересекающихся парабол, энергия диссоциации связи, энергия стабилизации радикала.

Аннотация

Разработан интеллектуальный программный агент, реализующий алгоритм оценки энтальпии образования свободных радикалов по кинетическим данным на основе гибридной базы знаний. Описана логическая структура базы знаний и алгоритм работы интеллектуального агента. Приведены результаты вычислительного эксперимента по предсказанию значений энтальпий образования свободных радикалов, производных от ацеталей. Проведено сравнение значений вычисленных энтальпий образования радикалов производных от ацеталей, нитрилов и нитросоединений с литературными данными. Сравнение показывает хорошее согласие с данными литературных источников. Построены линейные корреляции между энтальпией образования свободных радикалов, производных от ряда замещенных ацеталей. Вычислена энергия стабилизации замещенных фенильных радикалов. Показано, что сопряженная система π -электронов рядом с радикальным центром дестабилизирует радикал, как для электронодонорных, так и для электроноакцепторных заместителей.