

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

© Туманов\* Владимир Евгеньевич, Прохоров<sup>+</sup> 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](mailto:tve@icp.ac.ru)

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>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  $\pi$ -электронов рядом с радикальным центром дестабилизирует радикал, как для электронодонорных, так и для электроноакцепторных заместителей.