

## Представление химических реакций, реагентов и их термохимических свойств в интеллектуальной системе по физической химии радикальных реакций в жидкой фазе с использованием онтологической модели предметной области

© Амосова<sup>+</sup> Елена Сергеевна и Туманов\* Владимир Евгеньевич  
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:** радикальные реакции, константа скорости, энергия активации, органические молекулы, энергия диссоциации связи, интеллектуальные системы, предметная онтология.

### Аннотация

В статье представлен фрагмент онтологии предметной области по физической химии радикальных реакций в жидкой фазе. Представленная онтологическая модель предметной области включает в себя около 100 подклассов радикальных реакций, более 50 классов органических соединений и около 45000 свойств объектов (физико-химических свойств молекул, радикалов и радикальных реакций). Онтология разработана с использованием средства проектирования онтологий Protégé. Онтология будет использована в интеллектуальной системе научной осведомлённости по физической химии радикальных реакций.