

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

© Амосова⁺ 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

*Ведущий направление; ⁺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.