

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН
Научно-образовательный центр по общей и неорганической химии
Совет молодых ученых ИОНХ РАН**



V КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ ПО ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

*14 – 17 апреля 2015 года
г. Москва*

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Москва, 2015 г.

Цели конференции

- повышение результативности участия молодых ученых, аспирантов и студентов в научно-исследовательской деятельности;
- выявление и поддержка талантливой молодежи, создание условий для раскрытия её творческих способностей;
- ознакомление научной общественности с результатами исследований по приоритетным направлениям развития науки и технологий.

Направления конференции

- Синтез и изучение новых неорганических веществ и материалов.
- Химическое строение и реакционная способность координационных соединений.
- Теоретические основы химической технологии и разработка эффективных химико-технологических процессов.
- Методы и средства химического анализа и исследования веществ и материалов.

Организаторы

Организационный комитет:

академик В.М. Новоторцев
(*председатель*)
д.х.н. К.Ю. Жижин
д.х.н. В.К. Иванов
д.х.н. К.С. Гавричев
академик И.Л. Еременко
академик Ю.А. Золотов
академик Н.Т. Кузнецов
академик А.И. Холькин
д.т.н. А.А. Вошкин

Программный комитет:

к.х.н. С.С. Шаповалов
(*председатель*)
к.х.н. М.А. Рюмин
(*зам. председателя*)
к.х.н. Ю.А. Караванова
(*секретарь*)
к.х.н. А. Е. Баранчиков
к.х.н. О.В. Бойцова
к.х.н. А.Э. Дзюва
к.х.н. А.П. Жданов

к.х.н. Ю.А. Заходяева
к.х.н. Ю.В. Иони
д.х.н. М.А. Кискин
к.х.н. И.В. Козерожец
к.х.н. В.С. Попов
асп. А.Ю. Тихонов

Порядок работы: Конференция проводится с 14 по 17 апреля 2015 года в ИОНХ РАН. Регистрация участников будет проходить в холле 1 этажа ИОНХ РАН 14 апреля с 10:00 до 10:45. Открытие конференции будет проходить в конференц-зале ИОНХ РАН (1 этаж). Заседания будут проходить в конференц-зале ИОНХ РАН, в 217 аудитории (2 этаж) и в малой учебной аудитории (этаж А) в соответствии с программой конференции. Постерные сессии будут проходить 14 и 15 апреля в холле 1 этажа ИОНХ РАН.

Проезд: ИОНХ РАН (Ленинский проспект, 31). Станция метро «Ленинский проспект».

КОНСОЛИДАЦИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ ПО СВОЙСТВАМ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ

Дударев В.А.

Лаборатория полупроводниковых материалов ИМЕТ РАН

vic@imet.ac.ru

Информационное обеспечение специалистов достоверной информацией о свойствах современных материалов является необходимым условием развития промышленности и экономики. На современном этапе качественная информационная поддержка специалистов осуществляется с использованием специализированных информационных систем (ИС), основанных на материаловедческих базах данных (БД). Разработка и поддержка ИС по свойствам неорганических веществ и материалов ведется во многих странах. При этом наибольшего прогресса в этом добились США и Япония, которые на базе NIST (National Institute of Standards and Technology – Национальный институт стандартов и технологий, США) и NIMS (National Institute for Materials Science Technology – Национальный институт материаловедения, Япония) предлагают обширные комплексы материаловедческих баз данных. Для разработки современных полифункциональных материалов требуются знания самых разных свойств веществ, что естественным образом показывает необходимость интеграции материаловедческой информации. В последние годы необходимость интеграции была осознана не только на национальном, но и на международном уровне, что вызвало появление ряда программ по интеграции материаловедческих данных.

На текущий момент, одним из крупнейших разработчиков ИС по свойствам неорганических веществ и материалов в России является ИМЕТ РАН, в котором насчитывается шесть БД с доступом через Интернет: <http://www.imet-db.ru>. По количеству специализированных материаловедческих БД ИМЕТ РАН является лидером в России, поэтому неудивительно, что первые попытки интеграции информации по свойствам неорганических веществ были предприняты именно здесь.

Программная инфраструктура для интеграции материаловедческих ИС изначально разрабатывалась в ИМЕТ РАН с использованием передовых информационных технологий в рамках SOA-архитектуры (Service Oriented Architecture): XML, Web-services, .Net. Это позволило консолидировать кроссплатформенные ИС ИМЕТ РАН: БД по фазовым

диаграммам полупроводниковых систем “Диаграмма” (под управлением Oracle), БД по свойствам акустооптических, электрооптических и нелинейнооптических веществ “Кристалл”, БД по ширине запрещенной зоны неорганических веществ “BandGap” (под управлением Microsoft SQL Server) и др.

Первой попыткой международной интеграции ИС ИМЕТ РАН по материаловедению стала интеграция англоязычных версий ИС “Кристалл” и “BandGap” (<http://crystal.imet-db.ru/en/> и <http://bg.imet-db.ru/>) с англоязычной японской ИС “AtomWork” (http://crystdb.nims.go.jp/index_en.html), разработанной NIMS совместно с европейскими специалистами [1]. Важно отметить, что при согласовании принципов интеграции с японской стороной было решено использовать методику, разработанную в ИМЕТ РАН для объединения ИС на уровне химических систем.

Благодаря проделанной работе по международной интеграции, в настоящий момент пользователи англоязычных ИС ИМЕТ РАН могут не только просматривать релевантную информацию в японской ИС AtomWork, содержащей информацию о более чем 23 тыс. неорганических веществ, но и переходить и в другие материаловедческие БД, разработанные в NIMS (в связи с использованием SSO). Интеграция российских и японских БД по свойствам неорганических веществ вносит вклад в улучшение информационного обеспечения пользователей материаловедческих ИС обеих стран и открыло принципиально новые возможности, связанные с анализом накопленных химических данных, нахождением взаимосвязей и их использованием для компьютерного конструирования неорганических соединений [2]. Найденные закономерности (знания) позволяют сконструировать еще неполученные вещества с заданными свойствами, что расширяет возможности БД, превращая их из компьютерного справочника в интеллектуальные информационные системы. Такие интеллектуальные информационные системы дают возможность прогнозировать еще экспериментально неизученные вещества, оценивать их параметры и принимать решение о путях поиска новых веществ с заданными свойствами.

1. V.A.Dudarev, N.N.Kiselyova, Y.Xu, M.Yamazaki. Virtual integration of the Russian and Japanese databases on properties of inorganic substances and materials // MITS 2009. Symposium on Materials Database (NIMS), 2009. pp. 37-48.

2. Киселева Н.Н., Дударев В.А., Столяренко А.В. Интегрированная система баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов и ее использование для компьютерного конструирования новых соединений // Вестник Казанского технологического университета, Т. 17, №19, 2014, с. 372-376.