

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



В 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. Дзиова
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.