

программных продуктов могут использовать научные основы разработанной методологии в собственных проектах на коммерческой основе.

Библиографический список

1. Гунич С.В. Аппараты химической технологии: учеб. пособие / С.В. Гунич, Е.В. Янчуковская. — Иркутск: Изд-во ИрГТУ, 2007. — 56 с.
2. Гунич С.В. Моделирование и расчет на ЭВМ химико-технологических процессов: учеб. пособие / С.В. Гунич, Е.В. Янчуковская. 2 части. Иркутск: Изд-во ИрГТУ, 2010. 216 с.
3. Дытнерский Ю.И. Основные процессы и аппараты химической технологии / Ю.И. Дытнерский. М.: Химия, 1991. 452 с.
4. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии. 10-е изд., стер. М.: ООО ТИД «Альянс», 2008.
5. Комиссаров Ю.А. Процессы и аппараты химической технологии: учеб. пособие / Ю. А. Комиссаров, Л. С. Гордеев, Д. П. Вент. М.: Химия, 2011. 1229 с.
6. Ульянов Б.А. Процессы и аппараты химической технологии: учеб. пособие / Б.А. Ульянов, В.Я. Бадеников, В.Г. Ликучев. Ангарск: Изд-во АГТА, 2006. 743 с.
7. Янчуковская Е.В. Математическое моделирование химических реакторов: учеб. пособие / Е.В. Янчуковская, Н.И. Ушакова. Иркутск: Изд-во ИрГТУ, 2008. 52 с.

УДК 004:621.315.616

Е.А. Порысева, А.А. Краснов, Э.М. Кольцова

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия

СОЗДАНИЕ И РАЗРАБОТКА ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ В ОБЛАСТИ НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Авторами была разработана информационная система для хранения и анализа данных в области нанокomпозиционных материалов на основе различных наноструктур. Данная информационная система включает в себя базу данных, модуль полуавтоматического поиска и извлечения информации, классификацию наноматериалов, а также модуль анализа свойств композитов, позволяющий качественно и количественно проследить улучшение свойств нанокomпозита при его армировании различными наноструктурами.

The authors have developed an information system for storing and analyzing data in the field of nanocomposite materials based on various nanostructures. This information system includes a database module is semi-automatic search and retrieval, classification of nanomaterials, and the module of analysis of properties of composites, which allows qualitative and quantitative improvement of the properties of the nanocomposite trace with its reinforcing various nanostructures.

Активное развитие нанотехнологий и, как следствие, информационный бум в этой области привели к созданию в период с 1990-2012 гг. более 500 тысяч публикаций, затрагивающих тему нанокomпозитов, представителями более чем 120 стран мира. Поэтому, создание базы знаний, в которой были бы отражены основные свойства нанокomпозитов, их классификация, методы получения и применения является на данном этапе развития технологий

важной задачей. Полученные с использованием наноструктур композиты обладают уникальными свойствами: высокими каталитическими и магнитными характеристиками, селективной поглощающей способностью, триботехническими свойствами, термо- и химической стойкостью, высокими прочностью и пластичностью. Подобные характеристики приводят к формированию спроса на нанокompозиты в разнообразных областях промышленности: судостроении, авиастроении, химии, энергетике, медицине, биологии, экологии и др.

Разработанная специализированная обобщенная информационная система, направлена на работу с информацией в области нанокompозитов. Проводится классификация нанокompозитов по типу матрицы и по типу наполнителя:

- металлические
- неметаллические

с последующей детализацией.

То есть все нанокompозиты условно классифицируют по типу матрицы и по типу наполнителя, из которых они могут состоять. В созданной информационной системе рассматриваются их возможные вариации.

Архитектура информационной системы имеет многозвенное приложение. Такое приложение состоит из верхнего клиентского звена, содержащего интерфейсы для запроса и представления информации (написанного на языке JavaScript), сервера приложения, в котором хранятся модули логики и расчетные алгоритмы, и серверной части, отвечающей за расчеты и хранение данных. Серверная часть – база данных под управлением СУБД MySQL 5 и PHP.

Следует отметить, что разработанная информационная система была протестирована на следующих технических средствах (которые есть у авторов):

- 1) функциональный сервер 2 шт. (для баз данных и приложений);
- 2) веб-сервер;
- 3) автоматизированные рабочие места исследователей, обеспечивающие доступ к ресурсам функционального сервера.

Информационная часть состоит из:

- базы данных для централизованного хранения информации;
- модуля единого поиска, извлечения и классификации информации из сетевых ресурсов;
- модуля просмотра статей и нанокompозитов;
- модуля средств повышения доступности информации – поиска имеющейся информации в базе данных;
- модуля анализа свойств нанокompозитов;
- блока визуализации и вывода интересующей информации на экран.

Для организации функционирования структурированной базы данных хранения и анализа свойств в области нанокompозитов были разработаны 2 подсистемы: база данных свойств нанокompозитов и подсистема автоматического поиска и анализа данных.

В базу данных свойств нанокompозитов входят следующие объекты:

- объекты, содержащие единицы классификации нанокompозитов;
- объекты, содержащие исходные данные (тексты статей мирового научного сообщества в области органических нанокompозитов, назва-

ния статей, авторов, год издания, страна, издательство и др.);

- объекты инкапсуляции свойств нанокompозитов;
- объекты, содержащие методики исследования нанокompозитов;
- объекты, содержащие сферы применения нанокompозитов;
- модули анализа свойств (механических, электрических, оптических, теплопроводных) нанокompозитов на основе информации, хранящейся в базе данных.

Информация приводится в виде иерархии «Статья – рассматриваемая сущность – свойство сущности». Для сущности «статья» рассматриваются следующие свойства: название статьи, авторы, год, название и номер журнала, расположение статьи (страница, том), сама статья. Сущность «композит» рассматривается с точки зрения его названия, типа и всех сочетаний вопрос-ответ (по всем свойствам нанокompозита). Сущность «наноаппликатор» рассматривается с точки зрения названия, типа, всех сочетаний вопрос-ответ.

В базе данных содержится список «вопросов» и вариантов «ответов» на них. Ответ может иметь любой тип – числовой, текстовой, булевой, интервальный. Комбинация «вопрос-ответ-значение ответа» дает описание одного из свойств рассматриваемой сущности. Рассматриваются буквально все свойства нанокompозитов: физико-химические, тепловые, механические, электрические и т.д.

В подсистему автоматизированного поиска и анализа данных в области нанокompозитов входят следующие модули:

- модуль добычи данных;
- модуль анализа данных;
- модуль индексации и поиска;
- модуль взаимодействия с предметной областью.

Создан модуль единого поиска информации по данным научной интернет-платформы ScienceDirect. При работе модуль обрабатывает результаты запроса по поиску нужной статьи и выводит информацию на экран. Созданная подсистема позволяет полуавтоматически наполнять информационную систему данными. Извлечение фактов и необходимой для базы информации из статьи происходит на основе анализа структуры html-документа. Все обработанные html-страницы находятся в папке для хранения временных файлов модуля. Таким образом, в случае повторения поисковых запросов в течение одного сеанса работы с модулем будут обработаны страницы, находящиеся в папке для временных файлов. Так же применялся алгоритм, основанный на регулярных выражениях и поиске ключевых слов, которые были привязаны к вопросам в разработанной специальной базе данных. Вся подсистема, содержащиеся в ней модули и база данных написаны на языке Java и MySQL. Данный модуль позволил сократить процесс наполнения системы данными почти в 3 раза.

Информационная система обеспечивает визуализацию, возможность построения запроса и просмотр интересующей информации, а также обеспечивает наглядное представление разработанной классификации по нанокompозитам. Разработана единая оболочка информационного комплекса, для

объединения всех подсистем, организован доступ через web-интерфейс к комплексу для удобства работы с ним пользователям.

Коммерческая составляющая данной информационной системы в свете быстрых темпов развития нанотехнологий достаточно велика и носит информационный и научно-прикладной характер. Данная система позволяет использовать ее в научно-исследовательских работах (для быстрого и удобного получения данных о структуре, строении, физико-механических и химических показателях веществ), в учебно-образовательном процессе (для получения общей информации о предметной области), а также в производственной деятельности (для извлечения информации о качественном и количественном улучшении свойств композитных материалов, при введении в их матрицу различных армирующих наполнителей).

Данная работа выполнена в рамках государственного контракта с Российским Фондом Фундаментальных Исследований № 11-08-01072-а.

УДК 547.979.733 + 547.83

А.Н. Сергеева¹, В.П. Перевалов²

¹Институт элементарорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ НАВИГАТОРЫ ДЛЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ РАКА

В настоящем исследовании предполагается синтез и изучение фотофизических и фотохимических свойств конъюгатов бактериохлорина *a* с производными нафталимида, исследование флуоресцентных свойств данных бинарных систем и их способности к генерации синглетного кислорода в различных средах. В перспективе, в случае получения активно флуоресцирующего конъюгата, способного к эффективной генерации синглетного кислорода, становится возможным проведение флуоресцентной диагностики в режиме реального времени и, в случае обнаружения опухоли, лечение пациента с использованием методов фотодинамической терапии.

In the present paper the synthesis and study of photophysical and photochemical properties of the bacteriochlorin *a* conjugates with naphthalimide derivatives are discussed. The binary systems involved can be of interest for fluorescent diagnostics methods development in photodynamic cancer therapy.

Сегодня каждый пятый человек в мире умирает от рака. Онкологические заболевания чрезвычайно разнообразны и затрагивают глубинные механизмы жизнедеятельности клетки. Борьба с раком затруднена, поскольку заболевание связано с перерождением собственных клеток, механизм которого пока далек от окончательного понимания. Еще в начале двадцатого столетия было обнаружено, что раковая клетка может селективно накапливать и некоторое время удерживать окрашенные вещества, как находящиеся в организме (эндогенные порфирины), так и вводимые в него извне (экзогенные порфирины). Возникла идея воздействовать на этот участок светом с длиной волны, возбуждающей лишь данные соединения, причем общая энергия света должна быть невысокой, чтобы не происходило поражения