

УДК 544.72+004.65

ИНФОРМАЦИОННО-ПОИСКОВАЯ СИСТЕМА «MODIFIED SILICA DATABASE»

А. В. Пантелеймонов

Дано краткое описание новой информационно-поисковой системы «Modified silica database», к которой предоставлен открытый доступ: <http://www-chemo.univer.kharkov.ua/sio2db/>. Исходным массивом данных служит фактографическая и библиографическая информация о свойствах химически модифицированных кремнеземов. В настоящее время в базу внесена информация о более чем 100 реакциях на поверхности кремнеземов, модифицированных 11 органическими модификаторами с 10 сорбатами из 9 растворителей.

Ключевые слова: химически модифицированные кремнеземы, база данных, информационно-поисковая система.

Интенсификация исследований в области создания новых высокотехнологичных материалов, упорядоченных на нано- и микро- уровнях предполагает, в частности, объединение методов химии поверхности, теории анализа данных (data mining) и хемометрии с целью выявления факторов, определяющих морфологические и физико-химические свойства новых материалов и определение оптимальных условий их использования. В качестве ориентиров служат термодинамические и хроматографические базы данных, созданию и наполнению которых посвящены внушительные усилия, отраженные, в частности, в публикациях [1-13].

В области исследования химически модифицированных кремнеземов успехи гораздо скромнее, несмотря на подробное изучение механизмов реакций химического модифицирования поверхности кремнеземов, определение условий формирования топографии и структуры привитого слоя, накопление данных о синтезе кремнеземов с десятками различных привитых на поверхность лигандов и о взаимодействии закрепленных соединений с многочисленными компонентами растворов [14-21].

Ранее была предпринята попытка создания базы данных модифицированных кремнеземов [22]. Однако она не получила должного развития. Одной из причин явилась, видимо, сложность наполнения и доступа к данным. Настоящая работа является логическим продолжением работы [22], но использует иную идеологию хранения и обработки массивов. Кроме того, предлагаемая версия базы данных доступна в режиме информационно-поисковой системы (<http://www-chemo.univer.kharkov.ua/sio2db/>), что значительно облегчает использование и обработку информации.

Структура базы данных

Под базой данных (БД) принято понимать совокупность данных, относящихся к определенной области знания и организованных по установленным правилам, которые регламентируют принципы описания, хранения и обработки и не должны зависеть от программ обработки [23]. БД содержит необходимую информацию о предметной области и описание структуры хранимых данных. Она является одним из компонентов информационно-поисковой системы (ИПС), в которую также входят система управления базой данных (СУБД), выполняющая типовые процедуры управления данными, и прикладная программа, реализующая требуемый алгоритм ведения диалога пользователя с информационной системой для обслуживания БД и решения всего комплекса задач конкретной предметной области [24, 25]. Здесь существенно отметить следующие требования к базе данных: недопустимо дублирование данных в различных объектах и противоречивость характеристик объектов; база должна обеспечивать совместное использование хранимых данных, соблюдение стандартов в представлении данных, безопасность, независимость и целостность информации [23].

Широкое распространение получили три основных типа моделей данных: иерархическая, сетевая и реляционная. Каждая определяет соответствующую СУБД. Их достоинства и недостатки представлены в соответствующей литературе. Для создания описываемой базы данных была выбрана реляционная модель [26]. Основным способом структурирования данных в рам-

ках реляционной модели является таблица (в теории множеств – relation). Структура таблицы определяется совокупностью столбцов. В таблице не может быть двух одинаковых строк (нормализованный вид), при этом общее число строк не ограничено.

Описываемая БД содержит шесть таблиц: «Sorbate», «Sorbent», «Solvent», «Reaction», «Surface», «References». В состав каждой таблицы обязательно входит столбец с уникальным порядковым номером. Таблицы «Sorbate» и «Sorbent» содержат только названия сорбата и сорбента соответственно. В таблицу «Solvent», кроме названия, включены брутто-формула, значения диэлектрической проницаемости, дипольного момента и нормированного параметра полярности Райхардта растворителя, взятые из [27].

Таблица «Reaction» характеризует тип реакции, таблица «Surface» содержит данные о площади поверхности кремнезема ($\text{м}^2/\text{г}$) и концентрации привитых групп (моль/г). В таблицу «References» внесены данные о работах, информация из которых использовалась для наполнения базы данных.

Таблица «Base» является результирующей и состоит из ключей, образованных порядковыми номерами шести таблиц базы данных, и значений констант равновесия реакций (рис. 1).

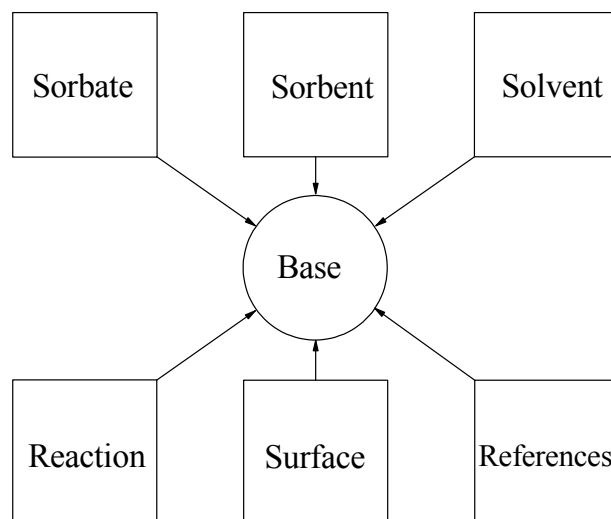


Рис. 1. Структура базы данных

Работа с информационно-поисковой системой

ИПС создана на серверном языке программирования PHP: Hypertext Preprocessor. Ее главная страница – это страница запроса («Modified silica database – Query»), которая содержит общую информацию о базе данных и дату последнего обновления. Пользователю доступны три поля поиска: «Sorbate», «Sorbent» и «Solvent». Любое из возможных значений каждого из полей можно выбрать в открывающемся меню. Они автоматически выбираются информационно-поисковой системой из соответствующих значений полей таблиц «Sorbate», «Sorbent» и «Solvent» и сортируются в алфавитном порядке. Опишем различные варианты заполнения полей. Запрос может быть выполнен в случае, когда пользователь оставляет пустыми все три поля. При нажатии кнопки «Search» выполняется поиск объектов в базе данных (таблица «Base»), и исходная страница сменяется страницей результатов («Results of search»). В рассматриваемом случае она будет содержать список всех доступных реакций. Присвоение определенных значений полям «Sorbate», «Sorbent» и «Solvent» сужает критерии поиска по ключам соответствующих таблиц. При обработке запроса подразумевается логическая связка «И». Например, оставляя пустыми поля «Sorbate» и «Sorbent» и указывая только значение поля «Solvent» (скажем, water), пользователь получит информацию о реакциях всех доступных в БД сорбатов на поверхности всех доступных сорбентов исключительно из водных растворов. Результатом поиска при заполненных полях «Sorbent» и «Solvent» и незаполненном поле «Sorbate» будут все доступные реакции на поверхности выбранного сорбента с участием выбранного растворителя.

На страницу результатов в любом случае выводится число найденных совпадений (соответствий заданным критериям поиска). Если есть одно или более совпадений, выводится таблица, включающая в себя сведения о сорбате, сорбенте, растворителе, особенностях поверхности и типе реакции, логарифмы общих констант равновесия и их дисперсии, а также литературные источники.

Дополнительного пояснения требуют столбцы «Reaction» и «Logarithms of constants». В них занесены сведения о реакции и логарифмах констант равновесий. Например, запись в столбце «Reaction» “ $2S+Q=S_2Q$ ” означает, что в цитируемой работе рассматривается сорбция сорбата S на поверхности Q с образованием комплексов SQ и S_2Q ; логарифмы общих констант равновесия реакций $S+Q=SQ$ и $2S+Q=S_2Q$ представлены в столбце «Logarithms of constants». Результаты поиска сортируются в хронологическом порядке.

На момент написания статьи в базу данных внесена информация о более чем 100 реакциях на поверхности кремнезёмов, модифицированных 11 органическими модификаторами с 10 сорбатами из 9 растворителей. Литературные источники представлены ссылками начиная с 1993 года.

Автор выражает признательность проф. Ю. В. Холину и проф. А. И. Коробову за ряд ценных замечаний в процессе написания статьи.

Работа выполнена в рамках проекта «Теоретичні моделі та ефективні комп'ютерні технології дизайну й оптимізації умов використання матеріалів, упорядкованих на нано- і мікро-рівнях», номер государственной регистрации 0110U001453.

Литература

1. A. E. Martell, R. M. Smith. Critical Stability Constants. V. 1-6. – New York-London: Plenum Press, 1974-1989.
2. L. G. Sillen, A. E. Martell. Stability Constants of Metal Ion Complexes. – London: Chem. Soc., 1964. – No 17. – 754 p.; 1971. – No 25. – 865 p.
3. http://www.rsc.org/education/teachers/resources/databook/index_databases.htm
4. <http://www.acadsoft.co.uk/scdbase/scdbase.htm>
5. <http://www.chemtec.org/>
6. D. A. Kulik. Sorption modelling by Gibbs energy minimisation: Towards a uniform thermodynamic database for surface complexes of radionuclides // Radiochim. Acta. – 2002. – V. 90. – P. 815-832.
7. A. J. Dallas, P. W. Carr. Critical Evaluation of Predicted and Measured Gas-Liquid Partition Coefficients in n-Hexadecane // J. Phys. Chem. – 1994. V. 98. – P. 4921-4939.
8. T. Tuzimski. Thin-Layer Chromatography (TLC) as Pilot Technique for HPLC. Utilization of Retention Database (RF) vs. Eluent Composition of Pesticides // Chromatographia. – 2002. – V. 56. – P. 379-381.
9. T. Tuzimski, E. Soczewiński. Use of Database of Plots of Pesticide Retention (RF) Against Mobile-Phase Compositions for Fractionation of a Mixture of Pesticides by Micropreparative Thin-Layer Chromatography // Chromatographia. – 2004. – V. 59. – P. 121-128.
10. D. A. Carr, M. Lach-hab, S. Yang, I. I. Vaisman, E. Blaisten-Barojas. Machine learning approach for structure-based zeolite classification // Microp. Mesop. Mat. – 2009. – V. 117. P. 339-349.
11. R. Natarajan, I. Nirdosh. Quantitative structure–activity relationship (QSAR) approach for the selection of chelating mineral collectors // Minerals Eng. – 2008. – V. 21. – P. 1038-1043
12. M. R. Euerby, P. Petersson. Chromatographic classification and comparison of commercially available reversed-phase liquid chromatographic columns using principal component analysis // J. Chromatography A. – 2003. V. 994 – P. 13-36.
13. Ł. Komsta. Prediction of the retention in thin layer chromatography screening systems by atomic contributions // Anal. Chim. Acta. – 2007. – V. 593. – P. 224-237.
14. F. Hoffmann, M. Cornelius, J. Morell, M. Froeba. Silica-based mesoporous organic-inorganic hybrid materials // Angew. Chem. Int. Ed. – 2006. – V. 45 – P. 3216-3251.
15. M. E. Diaz-Garcia, R. B. Laino. Molecular imprinting in sol-gel materials: recent developments and applications // Microchim. Acta. – 2005. – V. 149. – P. 19-36.

16. M. M. Collinson. Sol-gel strategies for the preparation of selective materials for chemical analysis // *Crit. Rev. Anal. Chem.* – 1999. – V. 29. – P. 289-311.
17. F. Di Renzo, H. Cambon, R. Dutartre. A 28-year-old synthesis of micelle-templated mesoporous silica // *Microp. Mat.* – 1997. – V. 10. – P. 283-286.
18. B. G. Trewyn, J. A. Nieweg, Y. Zhao, V. S.-Y. Lin. Biocompatible mesoporous silica nanoparticles with different morphologies for animal cell membrane penetration // *Chem. Eng. J.* – 2008. – V. 137. – P. 23-29.
19. A. Walcarius, M. M. Collinson. Analytical Chemistry with Silica Sol-Gels: Traditional Routes to New Materials for Chemical Analysis // *Annu. Rev. Anal. Chem.* – 2009. – V. 2. – P. 121-143.
20. Ю. В. Холин, В. Н. Зайцев. Комплексы на поверхности химически модифицированных кремнезёмов. – Харьков: Фолио, 1997. – 136 с.
21. Ю. В. Холин. Количественный физико-химический анализ комплексообразования в растворах и на поверхности химически-модифицированных кремнезёмов: содержательные модели, математические методы и их приложения. – Харьков: Фолио, 2000. – 288 с.
22. Д. С. Коняев, Ю. В. Холин. Фактографическая и библиографическая база данных по свойствам комплексообразующих кремнезёмов // *Вісник Харк. ун-ту.* – 1997. – No. 395. *Хімічні науки.* Вип 1. – С. 115-119.
23. К. Дж. Дейт. Введение в системы баз данных, 7-е издание. – М.-СПб.-К.: Вильямс, 2001. – 1072 с.
24. Химическая энциклопедия: В 5 т. Т. 2. – М.: Сов. энцикл., 1990. – 671 с.
25. В. И. Вершинин, Б. Г. Дерендяев, К. С. Лебедев. Компьютерная идентификация органических соединений. – М.: Академкнига, 2002. – 197 с.
26. J. J. Florentin. Consistency auditing of databases // *Computer J.* – 1974. – V. 17. – P. 52-58.
27. C. Reichardt, T. Welton. Solvents and solvent effects in organic chemistry (fourth, updated and enlarged edition). – Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2011. – 692 p.

References

1. A. E. Martell, R. M. Smith. Critical Stability Constants. V. 1-6. – New York-London: Plenum Press, 1974-1989.
2. L. G. Sillen, A. E. Martell. Stability Constants of Metal Ion Complexes. – London: Chem. Soc., 1964. – No 17. – 754 p.; 1971. – No 25. – 865 p.
3. http://www.rsc.org/education/teachers/resources/databook/index_databases.htm
4. <http://www.acadsoft.co.uk/scdbase/scdbase.htm>
5. <http://www.chemtec.org/>
6. D. A. Kulik. Sorption modelling by Gibbs energy minimisation: Towards a uniform thermodynamic database for surface complexes of radionuclides // *Radiochim. Acta.* – 2002. – V. 90. – P. 815-832.
7. A. J. Dallas, P. W. Carr. Critical Evaluation of Predicted and Measured Gas-Liquid Partition Coefficients in n-Hexadecane // *J. Phys. Chem.* – 1994. V. 98. – P. 4921-4939.
8. T. Tuzimski. Thin-Layer Chromatography (TLC) as Pilot Technique for HPLC. Utilization of Retention Database (RF) vs. Eluent Composition of Pesticides // *Chromatographia.* – 2002. – V. 56. – P. 379-381.
9. T. Tuzimski, E. Soczewiński. Use of Database of Plots of Pesticide Retention (RF) Against Mobile-Phase Compositions for Fractionation of a Mixture of Pesticides by Micropreparative Thin-Layer Chromatography // *Chromatographia.* – 2004. – V. 59. – P. 121-128.
10. D. A. Carr, M. Lach-hab, S. Yang, I. I. Vaisman, E. Blaisten-Barojas. Machine learning approach for structure-based zeolite classification // *Microp. Mesop. Mat.* – 2009. – V. 117. P. 339-349.
11. R. Natarajan, I. Nirdosh. Quantitative structure–activity relationship (QSAR) approach for the selection of chelating mineral collectors // *Minerals Eng.* – 2008. – V. 21. – P. 1038-1043
12. M. R. Euerby, P. Petersson. Chromatographic classification and comparison of commercially available reversed-phase liquid chromatographic columns using principal component analysis // *J. Chromatography A.* – 2003. V. 994 – P. 13-36.
13. Ł. Komsta. Prediction of the retention in thin layer chromatography screening systems by atomic contributions // *Anal. Chim. Acta.* – 2007. – V. 593. – P. 224-237.

14. F. Hoffmann, M. Cornelius, J. Morell, M. Froeba. Silica-based mesoporous organic-inorganic hybrid materials // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2006. – V. 45 – P. 3216-3251.
15. M. E. Diaz-Garcia, R. B. Laino. Molecular imprinting in sol-gel materials: recent developments and applications // *Microchim. Acta.* – 2005. – V. 149. – P. 19-36.
16. M. M. Collinson. Sol-gel strategies for the preparation of selective materials for chemical analysis // *Crit. Rev. Anal. Chem.* – 1999. – V. 29. – P. 289-311.
17. F. Di Renzo, H. Cambon, R. Dutartre. A 28-year-old synthesis of micelle-templated mesoporous silica // *Microp. Mat.* – 1997. – V. 10. – P. 283-286.
18. B. G. Trewyn, J. A. Nieweg, Y. Zhao, V. S.-Y. Lin. Biocompatible mesoporous silica nanoparticles with different morphologies for animal cell membrane penetration // *Chem. Eng. J.* – 2008. – V. 137. – P. 23-29.
19. A. Walcarius, M. M. Collinson. Analytical Chemistry with Silica Sol-Gels: Traditional Routes to New Materials for Chemical Analysis // *Annu. Rev. Anal. Chem.* – 2009. – V. 2. – P. 121-143.
20. Yu. V. Kholin, V. N. Zaitsev. Kompleksi na poverhnosti himicheski modifitsirovannih kremnezemov. – Kharkov: Folio, 1997. – 136 p. [in Russian].
21. Yu. V. Kholin. Kolichestvenniy fiziko-himicheskiy analiz kompleksobrazovaniya v rastvorah i na poverhnosti himicheski modifitsirovannih kremnezemov: soderzhatel'nie modeli, matematicheskie metody i ih prilozheniya. – Kharkov: Folio, 2000. – 288 p. [in Russian].
22. D. S. Konyaev, Yu. V. Kholin. Faktograficheskaya i bibliograficheskaya baza danih po svoystvam kompleksobrazuyuschih kremnezemov // *Visn. Hark. nac. univ.* – 1997. – No 395, Ser. Him., issue 1, P. 115-119. [ISSN 2220-637X (print), ISSN 2220-6396 (online)] [in Russian].
23. C. J. Date. Vvedenie v sistemy baz danih, 7th ed. – M.-SPb.-K.: Williams, 2001. – 1072 p. [in Russian].
24. Himicheskaya enciklopediya: V 5 t. T. 2. – M.: Sov. encikl., 1990. – 671 p. [in Russian].
25. V. I. Vershinin, B. G. Derendyaev, K. S. Lebedev. Kompyuternaya identifikatsiya organicheskikh soedineniy. – M.: Akademkniga, 2002. – 197 p. [in Russian].
26. J. J. Florentin. Consistency auditing of databases // *Computer J.* – 1974. – V. 17. – P. 52-58.
27. C. Reichardt, T. Welton. Solvents and solvent effects in organic chemistry (fourth, updated and enlarged edition). – Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2011. – 692 p.

Поступила в редакцию 27 июня 2012 г.

А. В. Пантелеймонов. Інформаційно-пошукова система «Modified silica database».

Наведено стислий опис нової інформаційно-пошукової системи «Modified silica database», до якої наданий відкритий доступ: <http://www-chemo.univer.kharkov.ua/sio2db/>. Вихідним масивом даних є фактографічна та бібліографічна інформація щодо властивостей хімічно модифікованих кремнеземів. На теперішній час до бази внесена інформація про більш ніж 100 реакцій на поверхні кремнеземів, модифікованих 11 органічними модифікаторами з 10 сорбатами з 9 розчинників.

Ключові слова: хімічно модифіковані кремнеземи, база даних, інформаційно-пошукова система.

A. V. Panteleimonov. Information retrieval system «Modified silica database».

A new open-access information retrieval system «Modified silica database» is briefly described (<http://www-chemo.univer.kharkov.ua/sio2db/>). It is created for systematizing available factual and bibliographic information about the properties of chemically modified silicas. Currently the system provides the information about more than 100 reactions at the silica surfaces, 11 organic modifiers, 10 sorbats and 9 solvents.

Key words: chemically modified silica, database, information retrieval system.

Kharkov University Bulletin. 2012. № 1026. Chemical Series. Issue 21 (44).