

20 лет сайту Лаборатории квантовой химии ОПР НИЦ КИ - ПИЯФ

В этом году исполняется 20 лет одному из первых научных (и первому, посвященному квантовой химии) сайтов Рунета – qchem.pnpi.spb.ru. Что интересного в этом небольшом сайте? Сейчас, когда любая уважающая себя организация считает своим долгом иметь свой собственный веб-сайт, стоит напомнить, что такая ситуация сложилась буквально в последние пятнадцать лет, а раньше само понятие веб-сайта относилось скорее к области *техногика*. Первый веб-сайт в домене **.ru**, согласно Википедии, появился в 1994 году (www.ru, его архивная версия находится по адресу <http://www.1-9-9-4.ru/>). Сайт группы квантовой химии (<http://qchem.pnpi.spb.ru>) был создан всего через три года, в 1997 году, причем создан научными сотрудниками которые не занимались профессионально сетями или интернетом, а просто интересовались современными технологиями и искали возможности применения таких технологий в области науки. История создания и развития сайта с самого начала была интересной, вот один из примеров: практически сразу после создания сайта, по запросу ‘PNPI’ в ведущем тогда интернет-поисковике Yahoo (Google еще не существовал), на первых трех позициях в выдаче оказывались ссылки именно на qchem.pnpi.spb.ru, а не на основной сайт ПИЯФ. Причина была в том, что первый администратор сайта, м.н.с. Т.А. Исаев (ныне к.ф.-м.н., с.н.с. ЛКХ и Ученый секретарь ОПР), зарегистрировал его в сервисе директорий Yahoo (в настоящее время этот сервис уже не существует https://en.wikipedia.org/wiki/Yahoo!_Directory), тогда как основной сайт ПИЯФ там зарегистрирован не был. Разумеется, при запросе 'PNPI' в Yahoo на первых позициях оказывался сайт, который был известен Yahoo. Руководство ПИЯФ было тогда очень озабочено тем, что «в Интернете по запросу ‘PNPI’ сначала идет сайт группы квантовой химии». Сейчас продвижением сайтов занимаются специализированные компании, это многомиллионный бизнес, а в 1997 году продвинуть сайт на первые позиции в выдаче ведущей мировой поисковой системы можно было ... просто вовремя зарегистрировав его в соответствующих сервисных службах!

История сайта qchem.pnpi.spb.ru – долгоиграющая пластинка, поэтому здесь мы просто приведем основные этапы развития qchem.pnpi.spb.ru с пояснениями (*курсивом*, более полная версия истории qchem.pnpi.spb.ru выложена на самом сайте):

- В 1997 году А.В. Титов привозит из Германии на двух CD дистрибутив Linux RedHat 4.4. *Сейчас каждый более-менее интересующийся computer software в курсе, что такое Linux и что такое дистрибутив Linux. Однако в 1997 году на большинстве компьютеров в ПИЯФ стояла MS-DOS, на некоторых, особенно продвинутых, графическая оболочка Windows 3.1. Что такое Linux, в ПИЯФ тогда знало может быть несколько человек.*
- М.н.с. Т.А. Исаеву было поручено объединить несколько персональных компьютеров IBM Pentium (*сверхсовременные для того времени компьютеры были куплены на средства совместного российско-немецкого гранта*) в локальную сеть с выходом на вычислительный кластер университета Вупперталя для выполнения молекулярных расчетов. *Одной из проблем с работой на удаленных компьютерах в Германии было крайне низкое качество связи, было практически невозможно работать в режиме удаленного терминала. В то же время от расчетов на этих компьютерах критически зависела возможность выполнения работ по гранту ИНТАС (в то время один*


из самых значительных грантов). Т.А. Исаев тогда разработал систему удаленного запуска заданий на компьютерах по электронной почте, которой затем несколько лет пользовались в том числе и для запуска заданий с домашних компьютеров.

- На одном из компьютеров группы квантовой химии летом 1997 года Т.А. Исаев запускает веб-сервер Apache. Практически сразу же принимается решение, что группе квантовой химии ПИЯФ необходим свой собственный веб-сайт. Сохранилась распечатка той самой первой веб-страницы (с правками А.В. Титова).

Molecular group page http://195.208.18.166/


Quantum Chemistry group

Laboratory of molecular beams
Petersburg Nuclear Physics Institute




Senior researcher- A.V. Titov


Group members



N.S. Mosyagin, PhD
Researcher



V.A. Baluev
Graduate student



R.A. Makarevitch, MS
Graduate student

Research profile:

Our group is mainly working upon development of electronic structure calculation methods of molecules containing heavy elements. The aim is to elaborate technique and programs which allow to perform very accurate calculations providing smallest computational expenses. It can be reached with the help of "two-step" methods which enable to "split" the correlation structure calculation of such molecules into two consequent calculations in valence and core regions. This activity was initiated by the experimental study of the Parity Non-Conservation (PNC) effects in such molecules as TlF and YbF and started in 1982 with PhD work of A. Titov. Thesis "Effective potentials and Generalized Brillouin theorem for electronic structure of molecules" was defined in 1986. In 1996, PhD thesis "Development of Relativistic Effective Core Potential method" was defended by N. Mosyagin where topics related to generation of Generalized Relativistic Effective Core Potential (GRECP) and RECP for transition and rare-earth elements were considered.

Now we are working in the following directions:

- theory and generation of RECPs for high precision calculations;
- non-variational and variational electronic structure restoration in core regions of heavy atoms-in-a-molecule after RECP calculation;
- molecular calculations and incorporation of the RECP technique into modern packages for correlation structure calculations such as MOLCAS, MRD-CI (Multi-Reference Configuration Interaction with single and Double excitations, and RCC (Relativistic Coupled-Clusters));
- calculation of matrix elements of operators (hyperfine structure, parity non-conservation effects etc.) which are singular in a vicinity of heavy nuclei;
- variational principles, spin-orbit interaction, unitary group, embedding potential etc.;

For details see our recent publications and preprints.

At present, our work is supported by grant of Russian Foundation for Basic Research (RFBR) N 96-03-33036, international RFBR(Russia)/DFG(Germany) grant N 96-03-00069G, INTAS-97 grant and grant of St-Petersburg government.

Our scientific contacts and cooperation:

- Researchers of the St.-Petersburg University (Russia)
- Group of Robert J. Buenker at the GH Bergische University (Wuppertal, Germany)
- Group of Uzi Kaldor (Tel Aviv University, ~~Israel~~ → *Израиль*)
- Edward Hinds (Sussex University, UK)

Are you interested?

If you are interested in knowing more about our work, current projects or you want to make some comments, do not hesitate to contact us...

1 of 2
7/17/97 3:05

Рис. 1 Самая первая страница сайта группы квантовой химии ПИЯФ в 1997 году.

Внизу справа можно увидеть дату создания страницы, а наверху справа ее адрес. Как можно заметить, вместо привычного `qchem.pnpi.spb.ru` на странице указан IP-адрес сайта. DNS-имя `qchem.pnpi.spb.ru` будет зарегистрировано немного позже, а тогда

мы просто задавали IP-адрес в строке браузера Netscape. HTML-код первой страницы был написан руками в текстовом редакторе vi.

- После регистрации доменного имени qchem.pnpi.spb.ru и регистрации сайта в сервисе директорий Yahoo, начинается официальная интернет-история сайта группы квантовой химии ПИЯФ.
- В начале 2002 года сайт существенно меняет дизайн (Рис. 2),

- [Members](#)
- [Research](#)
- [Publications](#)
- [Conference Talks](#)
- [Cooperation](#)
- [HECP Forum](#)
- [AMP Seminar](#)
- [Miscellaneous](#)



*Petersburg
Nuclear
Physics
Institute*

Laboratory of molecular beams

Quantum Chemistry Group

If you are interested in knowing more about our work, current projects or you want to make some comments, do not hesitate to [contact us](#). We are looking for motivated and talented undergraduate and graduate students to work in our group over diploma or theses. Sorry for possible inconsistencies with our WWW pages, the site is under reconstruction.

[Back to title page](#)

Рис. 2 Обновленная страница сайта группы квантовой химии ПИЯФ в 2002 году.

структура сайта усложняется, появляются фреймы, но html-код все еще пишется вручную, изменения на сайт вносятся непосредственно на компьютере, на котором сайт находится.

- В 2009 году новый администратор сайта, Л.В. Скрипников, переводит его на современную систему управления контентом, сайт приобретает свой современный вид.
- В настоящее время, в 2017 году, сайт qchem.pnpi.spb.ru является одним из самых современных и известных в своей области научных сайтов Рунета.
- И, наконец, финальный интересный факт – трудно поверить (зная размер современных инвестиций в поддержание и дизайн корпоративных сайтов), но сайт группы квантовой химии за все время своего существования обошелся ПИЯФ ровно в стоимость электроэнергии для поддержания компьютера с размещенным на нем сайтом во включенном состоянии.