

Компьютерные информационные ресурсы неорганической химии и материаловедения

Н.Н.Киселева, В.А.Дударев, В.С.Земсков

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А.Байкова Российской академии наук
119991 Москва, Ленинский просп., 49, факс (499) 135–8680*

Рассмотрены информационные системы, используемые в неорганической химии и материаловедении. Отмечены основные тенденции разработки современных информационных систем в этих областях: доступ к информации в сети Интернет, слияние документальных и фактографических баз данных, привлечение высококвалифицированных экспертов для оценки достоверности данных, оснащение баз данных средствами анализа информации, интеграция баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов.

Библиография — 126 ссылок.

Оглавление

I. Введение	162
II. Структура баз данных	163
III. Базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов	163
IV. Интеграция баз данных как тенденция разработки современных информационных систем в области материаловедения	171
V. Информационно-расчетные и информационно-аналитические системы	173
VI. Заключение	174
VII. Приложение	175

I. Введение

Сбор, анализ и классификация данных — неперенные этапы процесса научного познания. Многие годы сводную информацию традиционно публиковали в справочниках и монографиях.[†] Однако в настоящее время наука развивается столь стремительно, что справочники устаревают уже в типографиях. Резкое увеличение объема научной и технической

информации, получившее название «информационного взрыва», привело к тому, что химики и материаловеды должны тратить от четверти до трети рабочего времени на поиск нужных сведений. Появление компьютеров, удобных программных систем управления базами данных (СУБД) и, особенно, развитие глобальной сети Интернет способствовали созданию и активному использованию новой прогрессивной формы информационных ресурсов — компьютерных баз данных (БД). Их основными достоинствами являются оперативность обновления информации с появлением новых данных, автоматизация информационного поиска и возможность практически мгновенно получать необходимые сведения в любой точке мира. Именно базы данных становятся основным источником информации для тысяч специалистов. В настоящее время многие традиционные «книжные» справочники имеют компьютерную версию.

Для решения проблемы получения информации специалистами в области химии и материаловедения созданы и эксплуатируются различные БД по свойствам неорганиче-

Н.Н.Киселева. Доктор химических наук, заведующая лабораторией полупроводниковых материалов ИМЕТ РАН. Телефон: (499)135–2591, e-mail: kis@imet.ac.ru
Область научных интересов: базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов, компьютерное конструирование неорганических соединений, материалы для электроники.
В.А.Дударев. Кандидат технических наук, старший научный сотрудник той же лаборатории. Телефон: (499)135–2591, e-mail: vic@80port.ru
Область научных интересов: интеграция баз данных, базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов.
В.С.Земсков. Доктор технических наук, главный научный сотрудник той же лаборатории. Телефон: (499)135–8630, e-mail: zemskov@imet.ac.ru
Область научных интересов: физико-химические основы полупроводникового материаловедения, рост кристаллов, базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов, материалы для электроники.

Дата поступления 14 сентября 2009 г.

[†] Так, не одно поколение химиков-неоргаников и материаловедов используют основополагающие серии справочников Гмелина и Ландольта–Бернштейна (*Gmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistry*. Springer-Verlag, 1924–2010; Landolt–Bornstein. *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*. Springer-Verlag, 1883–2010). Сотни справочников по различным разделам неорганической химии и материаловедения, например ^{1–9}, являются настольными книгами специалистов в этих областях.

ских веществ и материалов. В настоящей статье дан краткий обзор компьютерных информационных ресурсов в данной предметной области и тенденций их развития. Авторы надеются, что знакомство с обзором поможет исследователям лучше ориентироваться при поиске источников данных.

II. Структура баз данных

Под базой данных обычно понимают совокупность взаимосвязанных данных под управлением СУБД, предназначенных для многоцелевого использования. Информация, содержащаяся в БД, организована по определенным правилам, предусматривающим общие принципы описания, хранения и манипулирования сведениями. База данных обеспечивает интеграцию логически связанных данных при их минимальном дублировании. Однако иногда термин «база данных» применяют только для обозначения взаимосвязанных таблиц данных информационной системы, в которую, помимо БД, входит комплекс средств автоматизации (СУБД, подсистема сетевого доступа, аппаратные средства, прикладные программы для решения комплекса задач в конкретной предметной области (приложения пользователя) и т.п.).

Главные задачи БД — оперативное обновление хранящейся информации и обеспечение ее удобного извлечения пользователем. Большое значение при реализации второй цели имеет этап проектирования БД, особенно разработка ее структуры. Структура БД может быть представлена в виде моделей данных различных уровней, перечисленных ниже.

Концептуальная модель данных — это знания о физических и логических объектах и их взаимосвязях. На этапе концептуального проектирования анализируются свойства и характеристики исследуемой предметной области и формируется структура БД, обычно представляемая в виде графа, узлы которого отражают объекты предметной области, а дуги — отношения между ними. Концептуальная модель данных является проблемно-ориентированной и системно независимой, т.е. не связана с выбором определенных СУБД, операционной системы и типа компьютера.

Логическая модель данных — СУБД-ориентированная структура, которая строится на основе концептуальной модели. В современных БД логическая модель данных представлена в виде совокупности реляционных таблиц.

Физическая модель данных — способ хранения информации на носителях в конкретной СУБД; строится на основе логической модели данных.

Разработка структуры БД для химических областей, особенно на концептуальном и логическом уровнях, — фундаментальная проблема, для успешного решения которой требуется привлечение высококвалифицированных специалистов — химиков и материаловедов, способных выявить взаимосвязи между параметрами объектов и процессов. Неудачное проектирование структуры БД в большинстве случаев приводит к трудностям автоматизации информационного поиска. Примером может служить БД¹⁰ по фазовым диаграммам неорганических систем (<http://www.matport.com/phase-diagram-center>),[‡] в которой, при наличии огромного фактического материала о кристаллохимических, термодинамических и других физических свойствах фаз, поисковые запросы в значительной степени огра-

ничены заданием набора компонентов химической системы. В связи с этим пользователь, чтобы найти, например, соединения с заданным типом кристаллической структуры, вынужден просматривать весь массив имеющихся данных.

По форме хранящейся информации БД можно условно разделить на два класса: документальные и фактографические. В первых основной единицей хранения является текстовый документ (статья, патент, производственная документация и т.п.), снабженный в большинстве случаев набором ключевых слов для ускорения поиска релевантной (соответствующей поисковому запросу) информации. В таблицах фактографических БД хранятся фактические данные (значения свойств, параметры процессов и т.д.). В отдельные классы можно выделить БД с графической информацией (картографические БД, БД спектров и т.п.), а также с видео- и аудиоинформацией, для работы с которыми предусмотрены специфические процедуры информационного поиска.

Документальные информационные ресурсы по химическим отраслям знания представлены в таких крупных БД, как, например, «Science-direct» (<http://www.sciencedirect.com>), «Wiley» (www.wiley.com), «Springer» (www.springer.com), «American Chemical Society» (www.acs.org), «Chemical Abstract Service» (www.cas.org), «STN» (www.stn-international.de); БД патентов, например «United States Patent and Trademark Office» (www.uspto.gov) или «Questel» (www.qpat.com) и т.д., а также в российских информационных системах ВИНТИ (www2.viniti.ru), «e-library» (www.elibrary.ru) и др. Как правило, указанные БД содержат электронные копии статей и книг традиционных печатных изданий и доступны (за определенную плату) в сети Интернет. Преимуществами электронной формы являются оперативность доставки информации пользователю (часто электронная версия публикуется в Интернете раньше, чем печатается в журнале) и возможность автоматизированного поиска нужной информации по ключевым словам, которыми снабжены электронные документы. В последнее время возросшие аппаратные и программные возможности современных ЭВМ позволяют проводить поиск и в полных текстах статей. Важнейшей проблемой разработки и эксплуатации документальных БД является обеспечение поиска релевантной информации. Возможные пути ее решения связаны с применением идей искусственного интеллекта.¹¹

Одна из тенденций последних лет — размытие границ между документальными и фактографическими БД: в традиционные документальные системы добавляются таблицы с фактографической информацией;¹² фактографические системы включают обширную текстовую информацию и соответствующие средства контекстного поиска, а также оснащаются контурами полнотекстовых документов в форматах pdf или html.^{13–22}

III. Базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов

В настоящее время разработано множество БД, содержащих информацию о свойствах неорганических веществ. Приведенный ниже перечень не исчерпывает и малой доли информационных систем в области неорганической химии и материаловедения. За пять последних лет число БД в этих предметных областях возросло более чем в два раза. Традиционно первое место занимают фактографические информационные системы, аккумулирующие информацию по термодинамическим и теплофизическим свойствам (рис. 1). Интенсивно разрабатываются и широко используются в

‡ В обзоре приведены электронные адреса по состоянию на конец 2009 г.

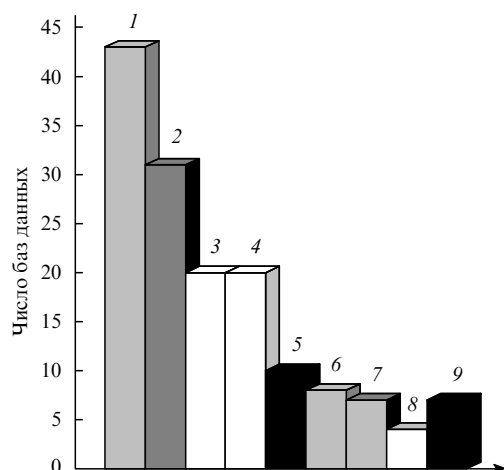


Рис. 1. Тематическое распределение БД по свойствам неорганических веществ и материалов.

1 — термодинамические или теплофизические свойства, 2 — механические свойства, 3 — кристаллографические и кристаллохимические свойства, 4 — электрические и электронные свойства, 5 — коррозионные свойства, 6 — оптические свойства, 7 — фазовые диаграммы, 8 — магнитные свойства, 9 — другие свойства.

фундаментальных и прикладных исследованиях, а также в промышленности БД с кристаллографической и кристаллохимической информацией. В последние годы утроилось число БД, содержащих сведения о механических (прочности, усталости, ползучести и т.д.) и электрических свойствах неорганических веществ и материалов.

Многочисленные фактографические БД по свойствам материалов разрабатываются и/или распространяются Американским национальным институтом стандартов и технологии (National Institute of Standards and Technology (NIST)), Японским национальным институтом материаловедения (National Institute of Materials Science (NIMS)), немецкой сетью научно-технической информации (STN), Европейской группой по термическим данным (Scientific Group THERMOCODATA Europe (SGTE)). Большую роль в координации связей между разработчиками БД выполняет Международная комиссия по научным и техническим данным (CODATA).

Общий объем компьютерных информационных ресурсов может служить показателем научного и промышленного потенциала страны. Мировой лидер в этой области — США — занимает первое место в списке разработчиков БД (рис. 2), главным образом, за счет развития информационных систем NIST. В последнее десятилетие в Японии неуклонно увеличивается число информационных ресурсов. Россия замыкает тройку лидеров. Следует отметить кооперацию исследователей разных стран по созданию таких дорогостоящих и высокотехнологичных продуктов, какими являются современные БД по свойствам веществ и материалов.

Большинство рассмотренных в обзоре (см. также Приложение) БД являются фактографическими. За счет сложности и достаточно жесткой структуры эти базы обеспечивают практически полную релевантность информационного поиска. Однако заранее заданная структура фактографических баз данных, как правило, ограничивает набор параметров, значения которых хранятся в таблицах БД.

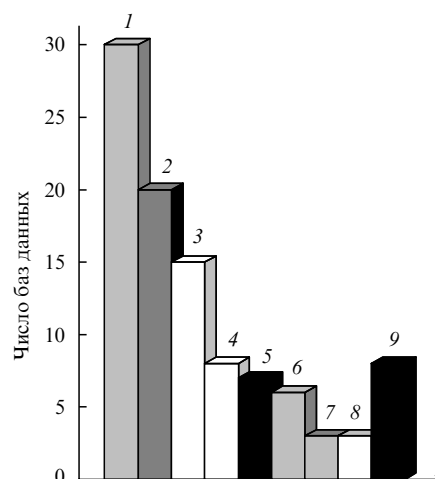


Рис. 2. Распределение БД по свойствам неорганических веществ и материалов по странам.

1 — США, 2 — Япония, 3 — Россия, 4 — Франция, 5 — Германия, 6 — Англия, 7 — Канада, 8 — Китай, 9 — другие страны.

Ниже кратко рассмотрены БД по свойствам неорганических веществ и материалов, разработанные в разных организациях. Критериями для отбора БД были востребованность специалистами и наличие информации о БД в статьях и Интернете. Помимо публикаций в периодической печати использованы описания БД, приведенные на сайтах STN, NIST, CODATA, NIMS, а также обзорная информация.²³

Более подробные сведения о БД по свойствам неорганических веществ и материалов содержатся в базе по информационным ресурсам неорганической химии, разработанной в ИМЕТ РАН (<http://iric.imet-db.ru>).

1. Базы данных по термодинамическим и теплофизическим свойствам неорганических веществ и материалов

Большинство БД по термодинамическим и теплофизическим свойствам неорганических веществ и материалов снабжено программами для термодинамического моделирования. Компонентами модели являются данные о фазах в химической системе, их термодинамических параметрах, условиях достижения равновесия и т.д. Информационные системы также содержат физико-химические модели фаз химической системы (уравнения состояния или функциональные зависимости характеристических функций фаз от состава и термодинамических параметров системы). Чтобы получить точные результаты, исходная информация о термодинамических свойствах веществ критически анализируется и проходит процедуру взаимного согласования.

а. Базы данных Объединенного института высоких температур Российской академии наук

«ИВТАНТЕРМО» — БД по термодинамическим свойствам неорганических веществ в стандартном состоянии^{24,25} разработана на основе хорошо известного справочника «Термические константы веществ»[§] и содержит численные данные о

§ Термические константы веществ. Вып. 1–10. (Отв. ред. В.П.Глушко). ВИНТИ, Москва, 1965–1982.

термодинамических свойствах индивидуальных веществ в широком диапазоне температур. Все данные являются взаимосогласованными в рамках основных законов термодинамики. Приведены сведения о погрешностях всех рекомендуемых величин. В настоящее время БД содержит сведения о свойствах > 3000 веществ, образованных практически всеми элементами Периодической системы Д.И. Менделеева. Принципиальной особенностью базы «ИВТАНТЕРМО» является то, что накапливаемые в системе данные не заимствованы из справочников или других БД, а получены авторами в результате критического анализа и обработки всех первичных данных, имеющихся в литературе, с помощью разработанных в ОИВТАН методов. Интернет-версия БД находится в свободном доступе.

«ТЕРМАЛЬ» — библиографическая БД с элементами фактографии по теплофизическим, термодинамическим и связанным с ними упругим, электрическим, магнитным, оптическим свойствам неорганических и простых органических веществ.^{26, 27}

«ЭПИБИБ» — библиографическая БД, ориентированная, в первую очередь, на моделирование газотранспортных процессов в микроэлектронике и процессов тепло- и массообмена по газовому тракту энергетических установок.²⁸

б. Базы данных Национального института стандартов и технологии США

«NISTTHERMO» — содержит информацию о термохимических свойствах органических и неорганических веществ;²⁹

«NIST/TRC Ideal Gas DB» — в этой базе хранятся сведения о теплофизических и термодинамических свойствах (энтальпии, энергии Гиббса, теплоемкости и пр.) органических и других соединений в состоянии идеального газа;³⁰

«IL THERMO» — содержит информацию о химических, теплофизических, термодинамических и транспортных свойствах ионных жидкостей;

«REFPROP» — включены данные о термодинамических и транспортных свойствах чистых газов и жидкостей как функции от температуры и давления;³¹

«JANAF» (Joint Army Navy Air Force) содержит данные о термохимических свойствах органических и неорганических веществ.³²

В рамках программы «Standard Reference Data» (SRD) NIST продолжает традиции получения надежных термохимических данных, заложенные в 20-е годы XX в. при выпуске «International Critical Tables». В БД (<http://webbook.nist.gov>) собраны сведения о свойствах тысяч органических и неорганических веществ (энтальпии образования, теплоте сгорания, теплоемкости, энтропии, энтальпии и температурах фазовых переходов, давлениях паров и т.д.). Указанный выше список не исчерпывает информационных ресурсов по теплофизике NIST. Например, в БД «NIST WebSCD» (Structural Ceramics Database) хранится информация о теплофизических, механических, физических свойствах оксидных, боридных, карбидных, нитридных и оксинитридных керамических материалов.

в. Базы данных ассоциации «THERMODATA»

Французской ассоциацией «THERMODATA»³³ разработаны следующие информационные системы.

«THERMDOC» — документальная БД содержит десятки тысяч библиографических ссылок на работы по термодинамике элементов, сплавов и растворов.

«THERMALLOY» — хранится термодинамическая информация, необходимая для построения моделей двойных, квазидвойных, тройных и квазитройных металлических, оксидных и солевых систем, имеющих значение для промышленного использования.

«THERMOCOMP» — содержит информацию о термодинамических свойствах элементов и чистых веществ, а также их реакциях.

«NOBL Metals» — включает термодинамические данные для систем с благородными металлами.

«Nuclea» — содержит данные о термодинамических свойствах материалов атомной энергетики и т.д.

«MOX-TDB» — включает термодинамические данные о металлических и оксидных системах с плутонием (эта БД непосредственно связана с системой «Nuclea»).

г. Базы данных «SGTE»

В рамках ЕС создан консорциум научных центров, разрабатывающих высококачественные термодинамические базы данных для неорганических систем и использующих их для решения прикладных задач — SGTE (Scientific Group Thermodata Europe).^{34, 35}

Помимо указанных выше БД «NOBL Metals» и «Nuclea», в настоящее время SGTE объединяет следующие БД по теплофизическим свойствам.

«PURE» (Национальная физическая лаборатория, Англия) — база данных о свойствах химических элементов, аккумулирующая сведения о термохимических свойствах для всех стабильных и многих метастабильных состояний элементов от 298.15 K до температуры газообразного состояния.

«SSUB» (Национальный политехнический институт, Франция) — содержит сведения о термодинамических свойствах более 4000 газообразных и твердых веществ.

«SSOL» (Национальная физическая лаборатория, Англия) — база данных о термодинамических свойствах растворов, включающая сведения о химических элементах, двойных и тройных системах, а также о свойствах некоторых более сложных систем.

«SALT» (Национальная физическая лаборатория, Англия) — база данных, содержащая сведения о термодинамических свойствах расплавов двойных, тройных и многокомпонентных солевых систем.

«SLAG» (компания Arcelor Research, Франция) — база данных для термодинамических расчетов равновесий в металлургических шлаках.

«G35» (Национальный политехнический институт, Франция) — база термодинамических данных для двойных систем с полупроводниковыми фазами $A^{III}B^V$.

д. Базы данных «THERMO-CALC».

Основное предназначение информационной системы «Thermo-Calc» — термодинамические расчеты и построение фазовых диаграмм. Эта система начала развиваться в Швеции в 1980-е годы в Королевском Технологическом институте.^{36–38} В 1997 г. была организована корпорация «Thermo-Calc Software», основной целью которой стало обеспечение информацией и программами расчетов в области термодинамики и диффузии.³⁸ Существует настройка на предметную область (химия, металлургия, материаловедение, геохимия и т.д.), которая осуществляется путем подключения к соответствующей базе с необходимой информацией:

«SSUB» — термодинамические свойства веществ;
 «SSOL» — термодинамические свойства растворов;
 «TCFE» — термодинамические свойства сталей и сплавов на основе железа;
 «TCNI» — термодинамические свойства сплавов на основе никеля;
 «TTAL» — термодинамические свойства сплавов на основе алюминия;
 «TTTI» — термодинамические свойства сплавов на основе титана;
 «TTTIAL» — термодинамические свойства сплавов на основе TiAl;
 «TTMG» — термодинамические свойства сплавов на основе магния;
 «COST2» — термодинамические свойства легких сплавов;
 «NSLD» и «USLD» — термодинамические свойства припоев;
 «SNOB» — термодинамические свойства сплавов с благородными металлами;
 «TTZR» — термодинамические свойства сплавов на основе циркония;
 «CCC» — термодинамические свойства спеченных карбидов;
 «SEMC» — термодинамические свойства полупроводников;
 «STBC» — термодинамические свойства покрытий для тепловых барьеров;
 «SLAG2» — термодинамические свойства металлургических шлаков на основе железа;
 «ION» — термодинамические свойства ионных растворов;
 «NOX» — термодинамические свойства оксидов;
 «SALT» — термодинамические свойства солевых расплавов;
 «TCMP» и «TCES» — информация для расчетов в области металлургии;
 «TCAQ» и «AQS» — термодинамические свойства водных растворов;
 «NUMT» — термодинамические свойства радиоизотопов;
 «NUOX» — термодинамические свойства оксидов радиоактивных элементов;
 «TCNF» — термодинамические свойства систем, используемых для разработки ядерного топлива;
 «GCE» — термодинамические свойства минералов.

е. Базы данных других организаций

«MTDATA» — система представляет собой программный комплекс для расчета фазовых равновесий в многокомпонентных системах, в состав которого входит БД, содержащая сведения о термодинамических свойствах материалов в широком диапазоне изменения параметров.^{39, 40}

«DETherm» — информационная система, включающая теплофизические данные, важные для разработки различных процессов в химической промышленности.⁴¹ Содержит описание свойств чистых соединений и смесей для десятков тысяч органических и неорганических веществ. В базе две подсистемы — фактографическая и библиографическая. В первой хранятся данные о термодинамических, электрических, транспортных и электрохимических свойствах, а также сведения о фазовых равновесиях для чистых веществ и смесей. Документальная подсистема включает библиографиче-

ское описание журналов, трудов конференций, справочников, диссертаций, отчетов, стандартов и рекламных проспектов.

«TPRC/TPMD» — хранятся данные о теплофизических (теплопроводности, теплоемкости, тепловом расширении и т.д.), механических, электрических, физических и других свойствах металлов, сплавов, неметаллов, газов, минералов, композитов, покрытий и т.д.⁴²

«MALT2» (Materials-oriented Little Thermodynamic Database for Personal Computers)^{43, 44} — содержит данные по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ, а также программы расчета равновесного состава и решения задач материаловедения. База данных была создана специальной группой, организованной японским обществом калориметрии и термического анализа. «MALT2» содержит такие сведения, как стандартная энтальпия образования, стандартная энергия Гиббса, стандартная энтропия, теплоемкость, сведения о теплоте фазовых переходов и изменениях энтальпии фазовых переходов и т.д. Эта база данных ориентирована на анализ процессов производства керамики, полупроводников, ядерных топлив, материалов для производства ядерных реакторов, анализа плазмохимических процессов и т.д.

«F*A*C*T». Программный комплекс «F*A*C*T» (Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics) создан в результате выполнения совместного проекта между двумя университетами — McGill University и Ecole Polytechnique de Montreal.⁴⁵ Проект, начавшийся в 1976 г., предполагал создание программных средств для работы с термодинамическими данными и решение задач металлургии. Для поддержки развития и использования программного комплекса «F*A*C*T» в научных разработках и в учебном процессе в 1984 г. в Ecole Polytechnique был основан исследовательский центр CRCT — Centre de Recherche en Calcul Thermochimique/Centre for Research in Computational Thermochemistry. F*A*C*T-Web предоставляет свободный доступ к информации о термодинамических свойствах индивидуальных веществ и химических реакциях, а также дает возможность рассчитывать равновесные составы термодинамических систем.

2. Базы данных по фазовым диаграммам неорганических систем

Фазовые диаграммы являются наглядной и достаточно информативной формой представления равновесий в неорганических системах. Многие БД по теплофизическим свойствам веществ (MTDATA, F*A*C*T, ADAMIS и т.д.) содержат подсистемы, в которых хранится информация о фазовых диаграммах и их графическое изображение. Это обстоятельство и создание удобных средств ввода и вывода графической информации стимулировали разработку специальных баз данных по фазовым диаграммам. Существенной особенностью таких БД является необходимость хранения не только табличной, но и графической информации.

Возможны различные методы представления фазовых диаграмм:¹³

— использование термодинамических моделей элементов диаграмм с возможностью последующей визуализации рассчитанных кривых;

— использование различных аппроксимирующих математических моделей элементов диаграмм (обычно полиномов) с последующей визуализацией рассчитанных кривых;

— табличное представление информации с использованием интерполирующих сплайнов для расчета данных между узлами таблицы (координаты точек из таблицы и сплайны используют для визуализации диаграммы);

— графический метод, при котором диаграмма вводится в ЭВМ с помощью какого-либо специального устройства (дигитайзера, сканера и т.п.) и преобразуется в формат, удобный для хранения в вычислительной машине; обратное преобразование переводит данные в графическую форму.

Тенденцией последних лет в разработке БД по фазовым диаграммам является широкое использование именно графического метода, который превосходит по технологичности все другие способы, обеспечивая при этом точность воспроизведения диаграмм, унификацию их описания, минимальный объем, необходимый для хранения полученного файла, удобную работу с графическим изображением фазовой диаграммы в сети Интернет с использованием обычных браузеров и т.п.

Рассмотрим некоторые БД по фазовым диаграммам.

«**Диаграмма**» — содержит фазовые диаграммы систем с полупроводниковыми соединениями, а также описание кристаллоструктурных, полупроводниковых и термодинамических свойств фаз.^{13, 14, 16, 17, 22, 46}

«**ACerS-NIST**» — включает информацию о многих (десятках тысяч) оксидных, халькогенидных, боридных, карбидных, нитридных, фосфатных и других неорганических системах.

«**ASM**» — представляет собой компьютерную версию известного справочника по двойным системам под редакцией Массальского⁶ и 10-томного справочника по тройным системам (*Handbook of Ternary Alloy Phase Diagrams*. (Eds P.Villars, A.Prince, H.Okamoto). ASM Int.; Materials Park, OH, 1995).

«**ADAMIS**» — термодинамическая БД по свойствам сплавов для микропайки, содержит термодинамическую информацию (потенциалы Гиббса, активность, теплоты смешения и образования и т.п.) о системах с Ag, Bi, Cu, In, Pb, Sb, Sn и Zn, а также рассчитанные с помощью программ, основанных на идеях CALPHAD, фазовые диаграммы этих систем.^{47–49}

«**Pauling File**». Локальная версия этой БД по фазовым диаграммам двойных систем и кристаллической структуре двойных соединений, распространяемая на компакт-дисках, разработана интернациональным коллективом исследователей (Швейцарии, Германии, Японии и США)^{12, 50} в конце 1990-х годов. В то время данная база была, пожалуй, лучшей по полноте, качеству графики и удобству использования среди БД по фазовым диаграммам. Позже появилась Интернет-версия этой БД с добавлением сведений о более сложных системах, которая, однако, значительно уступает локальному варианту и по качеству графики, и по удобству использования.

«**MSIT PDC**» (Materials Science International Team Phase Diagram Center) — информационная система, содержащая данные о нескольких тысячах фазовых диаграмм, в основном металлических систем.¹⁰ Для сбора и оценки информации для этой системы были привлечены специалисты разных стран. В системе также содержатся данные об изотермических, изобарических и политермических сечениях, таблицы инвариантных равновесий, диаграммы $\lg P - 1/T$, схемы фазовых реакций, таблица данных о кристаллической структуре, термодинамические данные, а также сведения о свойствах веществ и их применении.

Данные рассматриваемой информационной системы используются специалистами издательства «Springer» для создания серии справочников (Landolt – Bornstein. *Numerical*

Data and Functional Relationships in Science and Technology. New Series. Group IV: Physical Chemistry. Ternary Alloy Systems Phase Diagrams), доступных в сети Интернет (<http://www.springer.com>), которые по качеству представляемого материала и удобству извлечения информации значительно превосходят информационную систему MSIT PDC.

«**TAPP**» — содержит обширную информацию о теплофизических свойствах (свободной энергии образования, теплопроводности, вязкости, давлении пара, энтальпии, энтропии и т.д.) неорганических веществ в твердом, жидком и газообразном состояниях, а также фазовые диаграммы систем.⁵¹ Основные источники данных — информационные системы JANAF, DIPPR, TRC и т.д.

3. Базы данных, содержащие сведения о кристаллических структурах неорганических веществ

Базы данных, включающие кристаллографические и кристаллохимические данные, — одни из наиболее востребованных информационных ресурсов для химиков и материаловедов. Информация о кристаллической структуре присутствует в большинстве БД по свойствам неорганических веществ и материалов. Однако специализированные кристаллографические БД содержат подробные сведения о структуре, а именно: о сингонии, пространственной группе, параметрах элементарных ячеек, координатах атомов, температурных факторах, морфологии кристаллов, методах синтеза и исследования и графические изображения кристаллов и др. Одна из главных целей пользователей кристаллографическими БД — идентификация кристаллических фаз путем сравнения с уже имеющимися данными. Существенной трудностью разработки информационных систем в этой области является рассеяние публикаций по изданиям разного профиля: химическим, физическим, минералогическим, металлургическим и т.д.

«**ICSD**» (Inorganic Crystal Structure Database) в настоящее время является самой крупной БД в области неорганической кристаллохимии и кристаллографии.^{52–57} В ней содержится сведения о кристаллических структурах десятков тысяч неорганических соединений, в том числе керамик, минералов, чистых элементов и интерметаллических соединений. Информация, аккумулированная в БД, охватывает сведения о структурах, которые были опубликованы в периодических изданиях с 1913 г. по настоящее время. Запись в базе данных «ICSD» — это конкретный источник информации (статья, монография и т.п.) и содержащиеся в нем сведения о кристаллической структуре — название соединения, молекулярная формула, условия синтеза, кристаллографическая характеристика структуры (сингония, символ Пирсона, пространственная группа, параметры элементарной ячейки, координаты атомов, температурные факторы и др.). Обновление БД происходит два раза в год, при этом каждая обновленная версия пополняется в среднем ~2000 новых записей. Описываемая БД распространяется как Национальным институтом стандартов и технологий (США), так и немецкой сетью научно-технической информации STN.

«**NIST/Sandia/ICDD EDD**» — БД по электронной дифракции, содержит химическую и кристаллографическую информацию (химическую формулу, пространственную группу, параметры элементарной ячейки и т.д., а также ссылки на литературные источники) о десятках тысяч минералов, металлов, интерметаллических и других неорганических соединений, а также программное обеспечение для

идентификации микро- и макрокристаллических материалов.^{58–61}

«**NIST CD**» — БД по кристаллическим структурам, содержит сведения о химических, физических и кристаллографических свойствах сотен тысяч неорганических и органических веществ,⁶² таких как химическая формула и название, тип структуры, сингония, параметры и объем элементарной ячейки, пространственная группа, число формульных единиц в элементарной ячейке, отношения кристаллографических осей, плотность, метод исследования, некоторые физические свойства (температуры плавления и фазовых превращений, оптические параметры и т.д.), а также ссылки на источники информации.

«**NSD**» — аккумулирует сведения о кристаллической структуре металлов, интерметаллических соединений, сплавов и минералов, извлеченные из литературных источников, опубликованных до 1995 г. Данные оценены специалистами NIST и канадского Национального научного совета.

«**CRYSTMET**». Разработка этой БД^{63–65} была начата еще в 1960 г. в Лос Аламосской лаборатории и продолжена в Канадском институте научной и технической информации. С 1996 г. БД распространяется и поддерживается канадской компанией «Toth Information Systems». База данных содержит информацию о кристаллических структурах десятков тысяч интерметаллических соединений и минералов. Доступны следующие данные: ссылка на источник информации, химическая формула и название, тип структуры, символ Пирсона, пространственная группа, сингония, число формульных единиц, плотность (рассчитанная и экспериментально измеренная), параметры элементарной ячейки, координаты атомов, методы исследования, *R*-фактор и т.д. Глубина ретроспективы — более 80 лет.

«**Минкрис**» — включает сведения о природных и синтетических минералах, их структурных аналогах (неорганических соединениях со структурой минерала, например, шпинели, граната, перовскита), простых веществах и простых оксидах.^{66,67} Хранится следующая информация о веществах: название; спецификация по полезному свойству, составу, структуре, параметрам синтеза; кристаллохимическая формула; пространственная группа; число формульных единиц (*Z*); объем элементарной ячейки (расчетный); молярный объем (расчетный); плотность (расчетная); линейный и массовый коэффициенты поглощения излучения (расчетные); *R*-фактор и число рефлексов, включенных в расшифровку структуры; линейные и угловые параметры элементарной ячейки; число атомных позиций в элементарной ячейке; длина волны рентгеновского излучения для расчета характеристик вещества в поликристаллической форме; угловой интервал расчетной рентгенограммы вещества в поликристаллической форме. Помимо этого БД содержит сведения о параметрах базисных атомных позиций, индексы *hkl*, межплоскостные расстояния, относительные интегральные интенсивности, графическое изображение кристаллической структуры, графическое изображение штрих-диаграммы рентгенограмм веществ в поликристаллической форме, литературные ссылки и ссылки на публикации в других БД.

«**PDF**» — БД по порошковым дифрактограммам,^{68,69} содержит дифракционную, кристаллографическую и библиографическую информацию о неорганических и органических веществах. Помимо информации о порошковых рентгеновских дифрактограммах отдельных фаз в табличной форме (характерные межплоскостные расстояния и соответствующие им относительные интенсивности), условиях получения и измерения, приведены также данные о других физических и

кристаллографических свойствах. Чтобы обслуживать различные группы пользователей, БД спроектирована и распространяется в нескольких различных вариантах:

— «**PDF-2**» — продукт совместной разработки ICDD (International Center for Diffraction Data), FIZ Karlsruhe (Fachinformationszentrum Karlsruhe) и NIST и предназначена для анализа неорганических материалов. Чтобы способствовать ускоренной идентификации материала ICDD добавил в эту базу данных сведения о многих простых органических веществах.

— «**PDF-4+**» — усовершенствованная база данных, в которой «**PDF-2**» дополнена данными, ставшими доступными в результате сотрудничества ICDD с Material Phases Data System (MPDS) (см. Pauling File). Эта база данных предназначена как для идентификации материалов, так и для количественного анализа по методу Ритвельда, методу RIR (Reference Intensity Ratio) и методу анализа полного профиля. В БД хранятся цифровые дифрактограммы, молекулярная графика и атомные параметры. Эта дополнительная информация включена в «**PDF-4+**» для того, чтобы расширить возможности использования данных для количественного анализа тремя вышеупомянутыми методами.

— «**PDF-4/Минералы**» — комплектуется на основе «**PDF-4+**» и включает такую же дополнительную информацию по минералам и относящимся к минералам веществам.

— «**PDF-4/Органика**» — совместный проект ICDD и Кембриджского центра кристаллографических данных (CCDC). Эта база данных предназначена для идентификации органических и металлоорганических соединений. Она содержит данные о нескольких тысячах неорганических веществ, преимущественно наполнителей, используемых в фармацевтике.

«**CSD**» — содержит информацию о кристаллической структуре многих (сотни тысяч) органических и элементоорганических соединений.^{70–72} Приведены рентгеноструктурные и нейтронографические данные, а также значения некоторых физических свойств. Для каждого вещества в БД содержится информация, которую по «размерности» можно разделить на три типа (подсистемы).

Одномерная информация — библиографическое описание, информация о кристаллической структуре и данные о размерах кристаллической решетки и пространственных группах; сведения о полиморфизме, биологической активности и пр.

Двумерная информация — структура молекулы.

Трехмерная информация — трехмерное представление структуры молекулы, координаты атомов, длины и углы связей, ковалентные радиусы и др.

Все три подсистемы связаны друг с другом. Следует отметить, что данные этой базы проходят тщательную экспертную оценку на точность и правильность, что позволило выявить ошибки в публикациях.

4. Базы данных по другим физическим свойствам неорганических веществ и материалов

Выше отмечалось, что базы данных с теплофизической и кристаллографической информацией относятся к информационным системам, традиционно наиболее часто используемым химиками и материаловедом. В последние годы резко возросло число БД, в которых хранятся сведения о механических, коррозионных, электрических, оптических, магнитных и прочих свойствах неорганических веществ и материалов,

определяющих возможность их практического применения (см. Приложение). Крупные фирмы, научные центры, университеты создают и поддерживают информационные системы, с одной стороны, с целью обеспечения специалистов данными, необходимыми для исследований, а с другой — с целью рекламы своей продукции и разработок. Особо следует отметить БД по свойствам промышленных веществ американского Национального института стандартов и технологий («WebHTS», «NISTCERAM» и т.д.) и комплекс DIPPR Проектного института данных о физических свойствах США (Design Institute for Physical Property Data (DIPPR))^{73–77} базы данных японского Национального института материаловедения («CompoTherm», «Structural Materials DB», «Diffusion DB», «Database System for Pressure Vessel Materials» и т.д.),⁷⁸ систему баз данных IMET РАН («Диаграмма», «Фазы», «Кристалл», «Elements», «BandGap»).^{13–17, 21, 22, 46}

Сведения о механических свойствах (прочности, усталости, ползучести, ударной вязкости, твердости и т.д.) наиболее часто включаются в БД по материалам. Большинство БД содержат информацию о механических свойствах черных и цветных металлов и их сплавов, в первую очередь сталей («ASMDATA», «DMPME», «MATADOR», «CETIM-BDM», «METALCREEP», «MARTUF», «JSSR DB» и т.д.) и алюминиевых сплавов («METALCREEP», «AAASD», «ALFRAC» и т.д.), а также композитов («ASMDATA», «CETIM-BDM», «MSDRD» и т.д.) и керамических материалов («NISTCERAM», «MSDRD» и т.д.).

Широко используются БД, содержащие информацию об электрических свойствах веществ — электропроводности, диэлектрических и пьезоэлектрических свойствах, ширине запрещенной зоны и т.д. — «Кристалл», «BandGap», «Elements», «EMIS» (библиографическая БД), «MPMD», «Functional Ceramic Materials Database», «COPPERDATA», «Information system of rare earths», «HYDROGENE DATA», «INTERGLAD» и т.д.).

Информация о коррозионных свойствах металлов и сплавов представлена в таких базах данных, как «ASMDATA», «COPPERDATA», «DMPME», «MAT-DB», «MARTUF» и др.

Значительно меньше баз данных с информацией об оптических и магнитных свойствах неорганических веществ и материалов: «Кристалл» (полосы пропускания, показатели преломления, коэффициенты Селмейера, а также акустооптические, электрооптические, пьезооптические, упругооптические и нелинейнооптические свойства веществ), «MPMD» (показатели преломления материалов, применяемых в микроэлектронике), «Elements» (магнитная восприимчивость химических элементов), «Information system of rare earths» (показатели преломления и магнитные свойства РЗЭ), «INTERGLAD» и «SciGlass» (оптические свойства стекол).

5. Базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов IMET РАН

На примере баз данных, разработанных отечественными специалистами, рассмотрим структуру, принципы функционирования и основные тенденции в области разработки современных БД по свойствам неорганических веществ и материалов.

Разработка таких БД была начата в IMET РАН еще в 1980-е годы¹⁸ на основе ЭВМ БЭСМ-6. Появление первых персональных ЭВМ позволило создать БД, легко переносимые с одного компьютера на другой.^{14, 19, 79} Такие факторы,

как развитие сети Интернет и появление мощных персональных ЭВМ, послужили стимулами для разработки современных БД.^{13, 15–17} Базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов, разработанные в IMET РАН, можно разбить на две группы: содержащие краткую информацию о наиболее распространенных свойствах неорганических веществ («Фазы» и «Elements») и включающие подробную информацию о свойствах веществ и материалов, важных для практического применения («Кристалл», «Диаграмма», «BandGap»).

Все базы данных IMET РАН имеют доступ в сети Интернет, что соответствует одной из основных тенденций развития современных информационных систем в области материаловедения. Проводится еженедельное обновление информации БД.

При разработке программного обеспечения использовалась распределенная модель клиент–сервер, при которой реализуется разделение операций по обработке данных между сервером БД и персональным компьютером клиента — пользователя информационной системы. Комплекс программного обеспечения для каждой БД состоит из двух систем: системы удаленного доступа пользователей в сети Интернет и системы удаленного администрирования, которая позволяет вводить и редактировать информацию, а также поддерживать функционирование БД.

Система доступа к БД реализует классическую трехкомпонентную модель сервер БД – Web-сервер – пользователь.

Сервер БД осуществляет управление данными и их хранением. Под управлением СУБД Microsoft SQL Server (операционная система Windows Server) хранятся таблицы данных в БД «Фазы», «Кристалл», «Elements» и «BandGap», а СУБД «Oracle» (операционная система Solaris) используется для хранения информации в базе «Диаграмма».[†]

Web-сервер предназначен для обеспечения доступа к информации БД в сети Интернет и представления ее в удобном для пользователя виде. В качестве Web-сервера используется Internet Information Server (IIS) на платформе Windows Server, поддерживающий технологии ISAPI (Internet Server Application Programming Interface) и ASP (Active Server Pages). На Web-сервере содержатся ASP-документы (страницы) и ISAPI-приложения, с помощью которых запросы пользователей пересылаются серверу БД. Данные от сервера БД оформляются в виде html-страниц и посылаются пользователям. Для интеграции Web-сервера и сервера БД использован объектный интерфейс ActiveX Data Objects.

Для каждой из баз данных IMET РАН разработана диалоговая система администрирования, которая размещается на компьютере оператора или администратора БД, подключенного к локальной сети или к глобальной сети Интернет.

База данных по свойствам неорганических соединений «Фазы». В этой базе данных хранится информация о более чем 45 000 тройных и 15 000 четверных неорганических соединений. Информация извлечена из 24 000 публикаций.^{13, 16, 17, 20, 79} Структуру подсистемы, содержащей данные о тройных соединениях, иллюстрирует рис. 3. Структура подсистемы четверных соединений отличается только наличием дополнительной информации об изученных разрезах четверной системы.

Информация для формирования БД «Фазы» отбирается из периодических изданий, справочников, монографий, отече-

[†] Используются бесплатные тестовые версии СУБД.

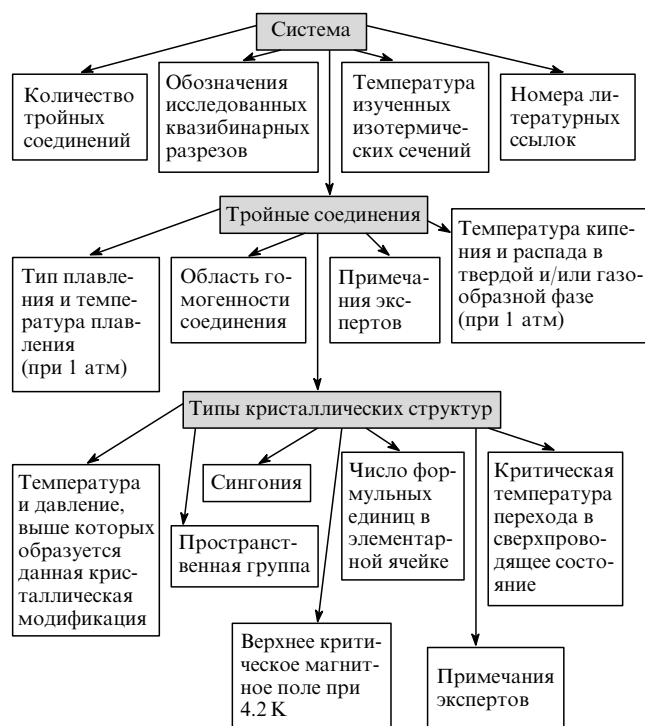


Рис. 3. Концептуальная структура блока данных по свойствам соединений БД «Фазы».

тов, а также реферативных журналов. Анализ литературы показал, что наиболее часто упоминаются следующие характеристики неорганических соединений: сингония, пространственная группа и число формульных единиц в элементарной ячейке, тип и температура плавления, температура распада соединения в твердой или газообразной фазах и температура кипения.

База данных «Фазы» содержит краткую информацию о соединениях. Более подробная информация о веществах, важных для применения в электронике, содержится в специализированных БД «Диаграмма», «Кристалл» и «BandGap».

База данных по фазовым диаграммам систем с полупроводниковыми соединениями «Диаграмма». База данных «Диаграмма»^{13–17, 46} содержит информацию о P – T – x -диаграммах полупроводниковых систем и о физико-химических свойствах образующихся в них фаз. К настоящему времени в этой БД собрана детальная информация о нескольких десятках систем, извлеченная из более чем двух тысяч литературных источников. Рассматриваемая БД служит ярким примером практической реализации одной из тенденций при разработке современных информационных систем, а именно, оценки достоверности хранящейся информации. Как правило, любые сведения, включаемые в БД по свойствам неорганических веществ и материалов, проходят этап простейшей «очистки» данных, т.е. выявления явных ошибок и опечаток. Однако оценка правильности и/или точности данных, приводимых в оригинальных литературных источниках, требует очень высокой квалификации специалистов. Базы, подобные БД «Диаграмма», содержащие информацию, собранную и оцененную с точки зрения ее достоверности высококвалифицированными специалистами, — это «золотой» информационный фонд как по качеству хранящихся данных, так и по затратам на их разработку. Однако эти затраты полностью

окупаются, так как пользователь получает не «сырую» информацию, прошедшую фильтрацию с целью отсеивания опечаток, а рекомендуемые значения, которые он может с уверенностью использовать для решения практических задач.

Разработка БД по фазовым диаграммам систем, содержащих полупроводниковые фазы, начата со сбора информации для двух- и трехкомпонентных систем. Основная информация, заносимая в БД, представлена на рис. 4 и 5. Следует отметить ценность написанных экспертами БД «Диаграмма» аналитических обзоров по фазовым диаграммам, в которых, в частности, дается дополнительная информация по системам, не включенная в реляционные таблицы. По сути, эти обзоры являются минимонографиями о конкретной системе и отражают современный уровень ее исследования.

Фазовые диаграммы в БД «Диаграмма» хранятся в виде растровых (формат jpg) и векторных (формат swf) изображений, что обеспечивает, с одной стороны, требуемую точность вывода деталей диаграммы, а с другой — масштабирование их рисунков и определение координат точек на T – x -проекциях и изотермических сечениях.¹³ Для просмотра рисунков пользователю необходим только стандартный Интернет-браузер, в котором загружена бесплатная дополнительная опция — Adobe Flash Player. Использование только стандартных браузеров (Microsoft Internet Explorer, Opera, Mozilla Firefox, Google Chrome и др.) выгодно отличает разработанную БД «Диаграммы» от других систем такого типа, например от БД по металлическим системам,¹⁰ которая требует загрузки нескольких мегабайт дополнительного программного обеспечения. Следует отметить, что применение стандартных программных средств пользователями — особенность всех БД по свойствам неорганических веществ и материалов, разработанных в ИМЕТ РАН.

Рассмотренная выше форма ввода, хранения и воспроизведения графической информации в БД «Диаграмма» является основной, однако в аналитических обзорах и спе-



Рис. 4. Концептуальная структура подсистемы данных по двойным системам БД «Диаграмма».



Рис. 5. Концептуальная структура блока данных по тройным системам БД «Диаграмма».

циальных таблицах БД хранятся аналитические модели, полученные в результате термодинамического согласования или статистической оптимизации фазовых диаграмм либо их элементов с использованием различных методик. Пользователь может применять эти модели для своих расчетов, подставив параметры, включенные в аналитические обзоры или хранящиеся в соответствующих таблицах термодинамических свойств и расчетных моделей БД. Помимо этого в соответствующих таблицах БД хранятся оцененные и согласованные экспертами числовые данные для элементов фазовых диаграмм.

База данных по свойствам акустооптических, электрооптических и нелинейнооптических веществ «Кристалл». В базе данных «Кристалл»^{13, 16, 17, 21, 22, 46} хранятся таблицы данных о свойствах акустооптических, электрооптических и нелинейно-оптических материалов, в число которых наряду с известными включены и новые, потенциально перспективные вещества. Структура БД и перечень свойств приведены на рис. 6. Табличная информация о каждом веществе дополнена аналитическим обзором, в котором кратко описана технология получения материалов, возможные области их применения, особые свойства веществ, не охваченные жесткой структурой БД, и, по возможности, дана экспертная оценка приводимых в базе данных сведений. Существенно, что большая часть информации БД собрана и оценена российскими специалистами, разрабатывающими и использующими упомянутые выше материалы.

В базе данных хранятся многочисленные графики в формате gif.

В настоящее время БД «Кристалл» содержит информацию о более сотни веществ, извлеченную из 3000 литературных источников. Существуют две версии этой информационной системы — русско- и англоязычная, обе они доступны зарегистрированным пользователям в сети Интернет.

База данных по ширине запрещенной зоны неорганических веществ «BandGap» — комплекс баз данных по свойствам материалов для электроники включает БД «BandGap», кото-



Рис. 6. Концептуальная структура блока данных по свойствам веществ БД «Кристалл».

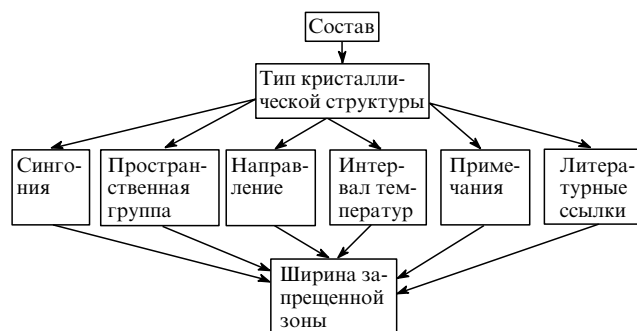


Рис. 7. Концептуальная структура блока данных по свойствам веществ БД «BandGap».

рая содержит информацию о ширине запрещенной зоны более четырех тысяч неорганических веществ (рис. 7);^{16, 17} помимо табличных данных представлена графическая информация. Разработана только англоязычная версия этой информационной системы, которая доступна зарегистрированным пользователям в сети Интернет.

IV. Интеграция баз данных как тенденция разработки современных информационных систем в области материаловедения

Ни одна из разработанных баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов не способна предоставить исчерпывающую информацию о всей совокупности свойств конкретного вещества или материала. Очень часто специалисты вынуждены просматривать десятки баз данных, чтобы найти необходимые им значения параметров данного вещества. Одним из путей решения проблемы является инте-

грация информационных источников с целью предоставления пользователям как можно более полной информации о неорганических веществах.

1. Подходы к интеграции баз данных

Возможны два подхода к интеграции баз данных. В соответствии с первым, подразумевается слияние всех данных в единую информационную систему. Именно такой подход является основой для методологии интеграции ETL (Extract, Transform, Load),⁸⁰ при которой данные из разных БД после унификации и «очистки» от неточностей загружаются в общее хранилище данных — «Data Warehouse». Однако при всей заманчивости создания такой мегабазы процедура унификации отличающейся по точности информации, аккумулированной в базах данных, созданных в разных организациях и/или в разных странах, с использованием различных языков, аппаратных и программных средств, является крайне сложной технической и организационной задачей, а ее разработка и эксплуатация требуют огромных финансовых вложений.

Другой путь — виртуальная интеграция БД по свойствам неорганических веществ и материалов и создание неоднородной распределенной информационной системы. Именно такой путь позволяет обеспечить независимость развития отдельных БД и организовать доступ ко всему массиву информации о конкретном веществе или материале для пользователя, что является основной целью интеграции.^{16, 17, 81}

При виртуальной интеграции БД возможны два основных технологических приема: 1) интеграция корпоративной информации (Enterprise Information Integration (EII));⁸² 2) интеграция корпоративных приложений (Enterprise Application Integration (EAI)).⁸³

В первом случае разрабатывается программный интерфейс доступа, с помощью которого можно извлекать необходимые данные из разных БД: строится некая центральная информационная система, которая взаимодействует с распределенными источниками данных, извлекает и предоставляет пользователю агрегированную информацию о запрашиваемом веществе из разных баз.

Использование второго подхода (EAI) целесообразно, если БД включают прикладные программы. При реализации этого подхода объединяются не сами базы, а только их пользовательские интерфейсы, которые осуществляют доступ к расчетным подсистемам. Такими интерфейсами могут быть Web-приложения соответствующих информационных систем.

В связи с тем что интегрируемые БД по свойствам неорганических веществ и материалов могут пересекаться по набору свойств веществ, а качество информации (достоверность и полнота) в каждой БД различно, необходима подсистема, поддерживающая экспертные оценки информации интегрируемых БД. Экспертиза должна проводиться высококвалифицированными специалистами, которые выставляют оценки, характеризующие качество данных в разных интегрируемых информационных системах. Таким образом, при наличии информации по какому-либо свойству вещества в нескольких интегрируемых БД интегрированная система должна не только выдавать сами данные, но и характеризовать степень их достоверности, рассчитанную на основе экспертных оценок. Разработка такой подсистемы экспертизы информации — одна из наиболее сложных организационных задач интеграции БД.

Квалифицированные пользователи не всегда доверяют экспертным оценкам коллег. В связи с этим БД по свойствам неорганических веществ и материалов должны содержать гиперссылки на полные тексты исходных публикаций, из которых извлечена информация.

2. Интегрированная система баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов ИМЕТ РАН

Опыт интеграции информационных ресурсов в области неорганического материаловедения^{16, 17} показал, что ни один из существующих подходов не способен решить все проблемы объединения информационных источников и программных приложений БД по свойствам неорганических веществ и материалов. Поэтому был предложен уникальный комплексный подход, сочетающий интеграцию на уровне данных и пользовательских интерфейсов (EII + EAI).^{16, 17, 81} В рамках предлагаемого подхода предоставляются как доступ к текущим пользовательским интерфейсам БД и свободное перемещение пользователей между ними (EAI), так и богатые возможности по сбору и агрегации информации, полученной из разнородных источников данных по свойствам веществ, согласно общей разработанной информационной схеме (EII). Использование такого подхода для интеграции БД по свойствам неорганических веществ и материалов, разработанных в ИМЕТ РАН, показало, что он предоставляет мощные инструментальные средства виртуальной интеграции информационных ресурсов, созданных с использованием разных компьютерных платформ, операционных систем, СУБД, отличающихся по языку, достоверности информации и другим показателям.¹⁶

В настоящее время интегрированная система баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов объединяет все разработанные в ИМЕТ РАН информационные системы (БД «Фазы», «Elements», «Диаграмма», «Кристалл» и «BandGap») (рис. 8), а также систему прогноза свойств неорганических соединений.⁸⁴ Особенность разработанной интегрированной системы заключается в том, что входящие в ее состав БД созданы с использованием различных СУБД и функционируют на принципиально различных компьютерных платформах: Sun (БД «Диаграмма») и Intel (прочие БД) с использованием разных операционных систем: Sun Solaris (БД «Диаграмма») и Microsoft Windows Server (прочие БД).

При интеграции баз данных необходимо предусмотреть возможность просмотра информации о выбранном пользователем веществе, содержащейся в других БД. Таким образом, нужен некоторый координирующий центр, который знает о том, в каких БД какая информация хранится. Иными словами, должен существовать справочник, некоторым образом описывающий информацию, содержащуюся в интегрируемых БД. Такую функцию выполняет предложенная нами^{16, 17} метабаза (см. рис. 8) — специальная база данных, содержащая справочные сведения о содержимом интегрируемых БД, а именно — о химических системах (которые идентифицируются набором входящих в их состав химических элементов) и веществах (которые идентифицируются соотношением химических элементов, входящих в их состав) и о соответствующих свойствах. Этих данных достаточно для поиска релевантной информации о свойствах веществ и материалов.

При работе с интегрированной системой зарегистрированный пользователь входит в одну из баз данных, размещенных по адресу <http://www.imet-db.ru>. При работе, например, с БД «BandGap» пользователь, выбрав вещество

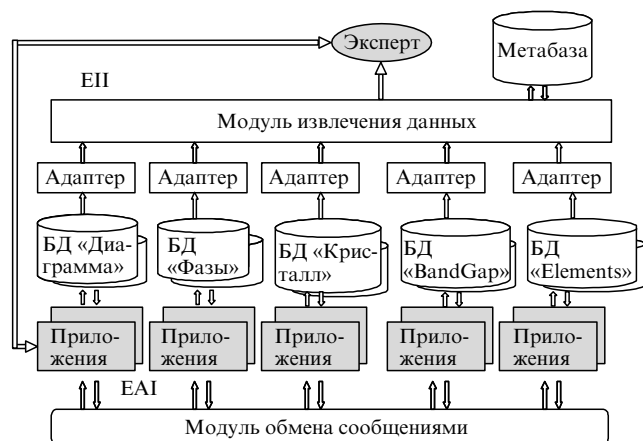


Рис. 8. Структура интегрированной системы БД по свойствам неорганических веществ и материалов ИМЕТ РАН.

из списка, получает на экране меню, содержащее в отдельных окнах ссылки на другие БД. При «щелчке» по этой ссылке пользователь автоматически попадает в БД «Диаграмма» на систему или в БД «Кристалл» на вещество, содержащие тот же набор элементов, что и выбранное соединение. Естественно, что такие переходы возможны, если базы содержат информацию об аналогичных веществах.

В настоящее время интеграция баз данных по свойствам веществ и материалов является основным направлением развития информационных ресурсов в материаловедческих областях. Именно интеграция позволит создать информационную структуру в области химии и материаловедения, позволяющую обеспечить специалистов достоверными и полными данными о свойствах веществ и материалов и доставить эту совокупную информацию в любую точку мира по сети Интернет.

V. Информационно-расчетные и информационно-аналитические системы

Основная задача создания и эксплуатации баз данных — информационное обслуживание специалистов. Однако они предоставляют значительно более широкие возможности оперирования информацией. Традиционная область использования информации БД по свойствам неорганических веществ и материалов — термодинамические и кристаллоструктурные расчеты. Примерами таких информационно-расчетных систем, объединяющих БД с программами термодинамических расчетов, могут служить системы «F*A*C*T»,⁴⁵ «MALT2»,^{45–47} «MTDATA»,^{34,35} «ThermoCalc»^{43,44} и т.п. Для информационно-расчетных систем характерно наличие «хорошего» аналитического описания зависимостей, при котором задача специалиста сводится к указанию системе команды о подстановке необходимых сведений из базы данных в одну из выбранных моделей.

Однако большинство задач, решаемых в химической и, особенно в материаловедческой практике, плохо поддаются формализации на уровне тех простых алгебраических структур, которые используются, например, в термодинамике. К таким задачам относятся, например, прогноз новых веществ с заданными свойствами, расшифровка спектральной информации, отбор веществ для применения в качестве материалов для определенных целей, разработка оптималь-

ных технологий получения материалов, разделение и идентификация веществ и т.п. В настоящее время такие задачи исследователи чаще всего решают, опираясь на свой опыт и интуицию. Для решения плохо формализуемых задач и создаются информационно-аналитические системы,⁸⁵ объединяющие БД по свойствам неорганических веществ и материалов и подсистемы анализа информации.⁸⁴

Информационно-аналитические системы получили большое распространение в бизнесе и управлении для автоматизации процесса принятия решений. Как правило, при использовании таких систем подсистемы анализа данных включают средства агрегации информации, обработки сложных многокритериальных запросов, программы простейшего статистического анализа и визуализации результатов. В более мощных системах, предназначенных для поиска сложных закономерностей в больших массивах информации, для анализа данных используют программы искусственного интеллекта. Именно такая информационно-аналитическая система для поиска закономерностей в базах данных по свойствам неорганических веществ и материалов и использования найденных закономерностей для прогнозирования возможности образования еще не полученных неорганических соединений, а также оценки их свойств разработана в ИМЕТ РАН.^{84,86}

Информационно-аналитические системы для конструирования неорганических соединений (рис. 9) помимо интегрированной системы БД и подсистемы анализа данных и прогнозирования, объединяющей комплекс программ обучения ЭВМ,^{87,88} включает базу найденных закономерностей (базу знаний) и базу прогнозов возможности образования и свойств еще не полученных неорганических соединений.

Информационно-аналитическая система позволяет решить две важные задачи. Во-первых, она дает возможность

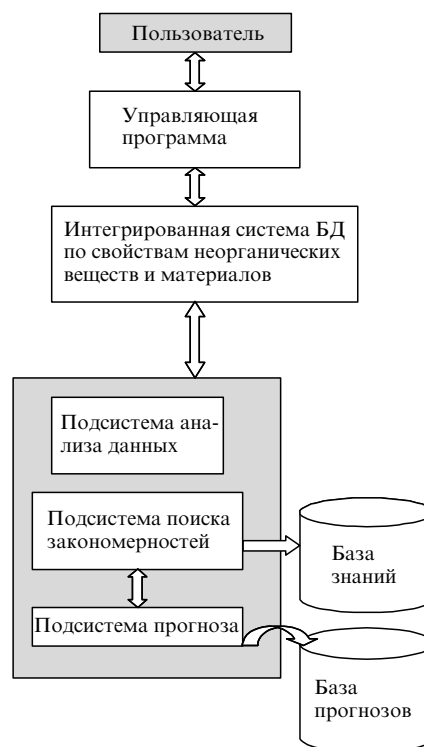


Рис. 9. Схема информационно-аналитической системы для конструирования неорганических соединений.

частично автоматизировать анализ огромной экспериментальной информации, накопленной химиками, для поиска закономерностей в данных и последующего конструирования новых соединений с заданными свойствами. Во-вторых, она расширяет возможности традиционных БД по свойствам веществ и материалов, предоставляя пользователю не только информацию об уже исследованных веществах, но и прогнозы для еще не изученных веществ и их свойств. Существенным преимуществом разработанной информационно-аналитической системы является то, что она имеет доступ в сети Интернет (<http://ias.imet-db.ru>). В этом случае пользователь получает оперативный доступ к «живым» данным и закономерностям. С помощью информационно-аналитической системы удалось спрогнозировать и оценить свойства еще не полученных неорганических соединений и оценить некоторые их свойства.⁸⁶

VI. Заключение

Базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов являются высокотехнологичными продуктами современной науки. Не случайно, что наибольшее количество БД по свойствам неорганических веществ и материалов разработано и эксплуатируется в наиболее развитых странах: США, Японии, России и др. Объемы финансирования разработок БД по свойствам материалов растут с каждым годом. Например, в Южной Корее ежегодно тратится на это около 7.4 млн долл.⁸⁹ Японский NIMS только в 2009 г. получил свыше 1.1 млн долларов на развитие своих информационных систем. В России практически не вкладываются средства в создание и развитие своих фактографических БД по свойствам неорганических веществ и материалов, что, несомненно, приведет к существенному отставанию в этой высокотехнологичной области. Следует отметить, что основной источник финансирования для подавляющего большинства баз данных — государственный бюджет. Однако сокращение затрат, связанных с необоснованным дублированием исследований, и затрат на поиск информации, возможность получения достоверных и полных данных о свойствах веществ во многом компенсирует вложенные государственные средства.

Современные информационные системы, основанные на компьютерных технологиях и содержащие достоверные данные, лишь формально относятся к инфраструктуре науки и техники. Процесс сбора и анализа информации для БД по свойствам неорганических веществ и материалов очень часто связан с фундаментальными теоретическими разработками и нередко стимулирует проведение новых экспериментальных исследований. Как правило, подсистемы расчета и прогноза свойств, которыми оснащены многие информационные системы, аккумулируют самые последние достижения теоретической химии и материаловедения.

В настоящее время без использования компьютерных баз данных немыслимо, например, проведение процедуры идентификации веществ. Тем не менее традиционное предназначение БД — информационное обслуживание. Крупные БД используются десятками тысяч специалистов. Доступ к информации в сети Интернет резко повысил число пользователей БД по свойствам неорганических веществ и материалов. Например, только в 2009 г. информационными системами японского NIMS обработано свыше миллиона запросов от ~45 тыс. специалистов из 12 тыс. организаций.⁹⁰ Большинство информации было необходимо для разработки и исследования новых материалов.⁹⁰ Наиболее востребована

информация о механических, физических и химических свойствах веществ.⁹¹ Наш опыт эксплуатации БД показал, что большинство пользователей информационных систем — это разработчики и исследователи новых веществ и материалов из академических институтов и университетов. Число пользователей БД, работающих на промышленных предприятиях, пока сравнительно невелико и в России, и за рубежом.⁹⁰

Анализ состояния исследований в области разработки и эксплуатации БД по свойствам неорганических веществ и материалов позволил выявить основные особенности современных информационных систем:

— доступ к информации в сети Интернет, который позволяет «доставить» необходимые и самые «свежие» данные непосредственно на рабочее место химика или материаловеда;

— экспертная оценка хранящейся информации, для которой привлекаются высококвалифицированные специалисты, что дает в руки пользователя не просто «сырую» информация, а рекомендуемые значения;

— оснащение БД средствами анализа информации: от традиционных термодинамических расчетов и статистических процедур до современных средств поиска закономерностей в массивах данных, позволяющих прогнозировать поведение объектов и обеспечивающих принятие решений;

— интеграция БД с целью предоставления пользователю наиболее полной информации о свойствах конкретного вещества, а также для последующего анализа совокупной информации о веществах и материалах.

Международное сотрудничество в области разработки и интеграции баз данных позволит предотвратить дублирование информации и снизить затраты на разработку информационных систем. Для инициирования этого процесса необходимо преодолеть серьезные организационные трудности, так как многие БД по свойствам неорганических веществ и материалов эксплуатируются на коммерческой основе. Однако обмен информацией и программами позволит повысить конкурентоспособность информационных систем.

Базы данных будущего в области неорганической химии и материаловедения — это глобальная интегрированная информационная система с доступом в сети Интернет, содержащая оцененные специалистами рекомендуемые значения параметров веществ, ссылки на полные тексты публикаций и оснащенная программным комплексом расчета и прогнозирования свойств.

Базы данных, информация которых наиболее востребована специалистами в области неорганической химии и материаловедения, кратко описаны в таблице Приложения. В том числе охарактеризованы БД, не упомянутые выше: по термодинамическим свойствам — «THERMOSALT»,⁹² «THERSYST»,⁹³ «NEA-TDB»,⁹⁴ «TPDS»⁹⁵ и др., фазовым диаграммам, физическим свойствам — «SSD»,⁹⁷ «СМЭТ»,⁹⁸ БД Института химии высокочистых веществ РАН,^{99, 100} «ЭПИДИФ»,¹⁰¹ «SUPERCON»,¹⁰² БД по керамическим материалам,¹⁰³ «C and HTC-DATA»,¹⁰⁴ «АВОГАДРО»,¹⁰⁵ «РАДЕН»,¹⁰⁶ «Gmelin-Online Datensystem»,¹⁰⁷ «MOGADOC»,^{108–110} «COPPERDATA»,¹¹¹ БД по аморфным материалам,¹¹² «HYDROGENE DATA»,¹¹³ «SciGlass»,^{114–117} «INTERGLAD»,¹¹⁸ «MAT-DB»,^{119, 120} «SPTDI»,¹²¹ БД по несоразмерным фазам,¹²² «Data-Free-Way»,^{123–125} БД по нанокompозитам.¹²⁶

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 09-07-00194, 08-07-00437, 08-01-90427 и 09-01-12060).

VII. Приложение

Таблица 1. Базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов.

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^a	Ссылки	Примечание
«ИВТАНТЕРМО» — БД по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ	Объединенный Институт высоких температур РАН (Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences)	Россия	www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan	24, 25	Теплофизические и термодинамические свойства (рекомендованные) для неорганических веществ
«ТЕРМАЛЬ» — БД по теплофизическим свойствам чистых веществ	То же	»	www.thermophysics.ru	26, 27	
«ЭПИБИБ» — библиографическая БД по потенциалам взаимодействия и транспортным свойствам разреженных нейтральных газов	»	»	www.thermophysics.ru	28	
«NISTTHERMO» — БД по термодинамическим свойствам неорганических и органических веществ	Национальный институт стандартов и технологий (National Institute of Standards and Technology)	США	www.nist.gov/srd/nist103b.htm ; www.nist.gov/srd/nist103a.htm	29	
БД по идеальным газам	То же	»	www.nist.gov/srd/nist88.htm	30	
«IL Thermo» — БД по ионным жидкостям	»	»	www.nist.gov/srd/nist147.htm	См. ^b	
«REFPROP» — БД по термодинамическим и транспортным свойствам чистых газов и жидкостей	»	»	www.nist.gov/srd/nist23.htm	31	
БД по теплофизическим свойствам газов, используемых в полупроводниковой промышленности	»	»	http://properties.nist.gov/fluidsci/semiprop	См. ^b	
«THERMODATA» — БД по термодинамическим свойствам неорганических веществ	Ассоциация THERMODATA	Франция	http://thermodata.online.fr	33	Библиография по термодинамическим и теплофизическим свойствам неорганических соединений и сплавов, а также по фазовым диаграммам
«THERMALLOY» — БД по термодинамическим свойствам неорганических веществ	То же	»	http://thermodata.online.fr/theraloy.html	См. ^c	
«THERMOCOMP» — БД по термодинамическим свойствам неорганических веществ	»	»	http://thermodata.online.fr/anglais.html	См. ^c	

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^a	Ссылки	Примечание
«MTDATA» — БД и пакет программ для расчета фазовых равновесий и термодинамических свойств многокомпонентных систем	Национальная физическая лаборатория (National Physical Laboratory)	Англия	www.npl.co.uk/server.php&show=ConWebDoc.1226	38, 39	
«DETERM» — БД по теплофизическим свойствам чистых веществ и смесей	Общество химической технологии и биотехнологии (Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. (DECHEMA))	Германия	http://i-systems.dechema.de/detherm	41	Доступна в сети STN
«TPRC/TPMD» — БД по теплофизическим свойствам	Информационный центр численного анализа и синтеза Университета Пурдью (Center for Information and Numerical Data Analysis and Synthesis of Purdue University)	США	https://cindasdata.com	42	
«SGTE» — БД по термодинамическим свойствам неорганических веществ	Европейская научная группа THERMODATA (Scientific Group THERMODATA Europe)	ЕС	www.sgte.org	34, 35	
«THERMO-CALC» — термодинамическая БД и программы для термодинамических расчетов	Корпорация «Thermo-Calc Software» (Thermo-Calc Software Inc.)	Швеция	www.thermocalc.com	36–38	
«PPDS» — термодинамическая БД и программы для термодинамических расчетов	Национальная инженерная лаборатория (National Engineering Laboratory)	Англия	www.ppds.co.uk	См. ^c	Программное обеспечение для термодинамических расчетов и БД по теплофизическим свойствам газов и жидкостей
«MALT2» — БД данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ с программами расчета равновесного состава	Японское общество калориметрии и термического анализа (Japan Society of Calorimetry and Thermal Analysis)	Япония	www.kagaku.com/malt	43, 44	
«F*A*C*T» — БД по термодинамическим свойствам неорганических веществ и программы для термодинамических расчетов	Политехническая школа Монреаля, Университет МакЖиль, Центр исследований в вычислительной термохимии (Ecole Polytechnic de Montréal, McGill University, Centre de Recherche en Calcul Thermochimique/Centre for Research in Computational Thermochemistry)	Канада	www.crct.polymtl.ca/fact	45	
«ADAMIS» — БД по свойствам сплавов для микропайки	Университет Тохoku (Tohoku University)	Япония	—	47–49	Термодинамические свойства сплавов для микропайки
«THERMOSALT» — БД по термодинамическим свойствам смесей расплавленных солей	Университет Прованса (Universite de Provence)	Франция	—	92	

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^а	Ссылки	Примечание
«THERSYST» — БД по теплофизическим свойствам сплавов	Институт ядерной энергии и энергетических систем Университета Штуттгарта (Institute for Nuclear Energy and Energy Systems of University of Stuttgart)	Германия	—	93	Теплофизические и термодинамические свойства твердых алюминевых, магниевых и титановых сплавов
БД по термодинамическим свойствам	Национальный институт материаловедения (National Institute of Materials Science)	Япония	www.nims.go.jp/cmssc/pst/database/periodic.htm		Термодинамические данные и фазовые диаграммы для двойных систем
«THERM PROP» — БД по термодинамическим свойствам минералов	Геологическая инспекция США, Национальный центр термодинамических данных для минералов (US Geological Survey, National Center for Thermodynamic Data of Minerals)	США	—	См. ^с	
«NEA-TDB» — БД по теплофизическим свойствам актинидных соединений и других веществ для ядерной энергетики	Агентство по ядерной энергетике (Nuclear Energy Agency)	Франция	www.nea.fr/html/dbtdb/	94	
«TPDS» — БД по теплофизическим свойствам	Национальный метрологический институт Японии, Национальный институт передовой прикладной науки, Университет Кейо (National Metrology Institute of Japan, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Keio University)	Япония	http://riodb.ibase.aist.go.jp/TPDB/DBGVsupport/English/	95	Теплофизические свойства неорганических и органических веществ. Основу БД составляет справочник <i>Japan Society of Thermophysical Properties; Thermophysical Properties Handbook</i> . (2nd Ed.). Yokendo, Tokyo, 2008
БД по химической кинетике	Национальный институт стандартов и технологий (National Institute of Standards and Technology)	США	http://kinetics.nist.gov/kinetics/index.jsp	См. ^б	Газофазные кинетические данные
«Диаграмма» — БД по фазовым диаграммам систем с полупроводниковыми фазами	Институт металлургии и материаловедения им. А.А.Байкова РАН (A.A.Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of Russian Academy of Sciences)	Россия	www.diag.imet-db.ru	13–17, 46	Фазовые диаграммы систем с полупроводниковыми соединениями; кристаллоструктурные, полупроводниковые и термодинамические свойства фаз
БД по фазовым диаграммам	Национальный институт стандартов и технологий, Американское керамическое общество (National Institute of Standards and Technology, American Ceramic Society)	США	www.nist.gov/srd/nist31.htm	См. ^б	Фазовые диаграммы неорганических систем

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^a	Ссылки	Примечание
«Pauling File» — БД по фазовым диаграммам двойных систем и кристаллической структуре двойных соединений	Японская научно-техническая корпорация, Фирма «Material Phases Data System», Национальный институт материаловедения (Japan Science and Technology Corporation, Material Phases Data System, National Institute for Materials Science)	Япония, Швейцария	http://crystdb.nims.go.jp	12, 50	
«MSIT-PDC» — БД по фазовым диаграммам неорганических систем	Фирма «Materials Science International Services, GmbH»	Германия	www.matport.com/phase-diagram-center/buy-online/purchase/selectElements	10	
БД по фазовым диаграммам	Американское общество металлов (American Society for Metals)	США	www.asminternational.org/asmenterprise/apd/help/About.aspx	См. ^c	
«FactSage» — БД по фазовым диаграммам	Центр исследований в вычислительной термохимии (Centre de Recherche en Calcul Thermochimique/Centre for Research in Computational Thermochemistry)	Канада	www.crct.polymtl.ca/fact/	45, 96	
«TAPP» — БД по фазовым диаграммам и термодинамическим свойствам неорганических веществ	ESM Software	США	—	51	
«ICSD» — БД по кристаллической структуре неорганических веществ	Информационный центр в Карлсруэ, Национальный институт стандартов и технологий (Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ Karlsruhe), National Institute of Standards and Technology)	Германия, США	www.nist.gov/srd/nist84.htm	52 – 57	
БД по электронной дифракции	Национальный институт стандартов и технологий, Национальная лаборатория Сандия, Международный центр по дифракционным данным (National Institute of Standards and Technology, Sandia National Laboratory, International Centre for Diffraction Data)	США	www.nist.gov/srd/nist15.htm	58 – 61	
«NIST CD» — БД по кристаллическим структурам	Национальный институт стандартов и технологий (National Institute of Standards and Technology)	США	www.nist.gov/srd/nist3.htm	62	

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^a	Ссылки	Примечание
«NSD» — БД по кристаллической структуре металлов, интерметаллидов, сплавов и минералов	Национальный институт стандартов и технологий (National Institute of Standards and Technology)	США	www.nist.gov/srd/nist83.htm	См. ^b	
«CRYSTMET» — БД по кристаллическим структурам интерметаллических соединений	TOTH — Корпорация информационных систем (TOTH Information Systems, Inc.)	Канада	www.tothcanada.com	63–65	
«Минкрис» — кристаллографическая и кристаллохимическая БД для минералов и их структурных аналогов	Институт экспериментальной минералогии РАН (Institute of Experimental Mineralogy of Russian Academy of Sciences)	Россия	http://database.iem.ac.ru/mincryst	66, 67	
«PDF» — БД по порошковым дифрактограммам неорганических и органических веществ	Международный центр по дифракционным данным (International Center for Diffraction Data)	США	www.icdd.com	68, 69	
«CSD» — БД по кристаллической структуре органических и элементоорганических веществ	Кембриджский центр кристаллографических данных (Cambridge Crystallographic Data Centre)	Англия	www.ccdc.cam.ac.uk	70–72	
«SSD» — БД по структуре поверхности	Национальный институт стандартов и технологий (National Institute of Standards and Technology)	США	www.nist.gov/srd/nist42.htm	97	Данные о структуре поверхности неорганических и органических веществ
«Фазы» — БД по свойствам неорганических соединений	Институт металлургии и материаловедения им. А.А.Байкова РАН (A.A.Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of Russian Academy of Sciences)	Россия	www.phases.imet-db.ru	13, 16, 17, 20, 79	
«Кристалл» — БД по веществам с особыми акустооптическими, электрооптическими и нелинейнооптическими свойствами	То же	»	www.crystal.imet-db.ru	13, 16, 17, 21, 22, 46	
«BandGap» — БД по ширине запрещенной зоны неорганических веществ	»	»	www.bg.imet-db.ru	16, 17	
«Elements» — БД по свойствам химических элементов	»	»	www.phases.imet-db.ru/elements	17	
«СМЭТ» — БД по свойствам материалов для электронной техники	Институт неорганической химии им. А.В.Николаева СО РАН (A.V.Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences)	Россия	—	46, 98	Физические, термодинамические, полупроводниковые и кристаллоструктурные свойства полупроводниковых материалов

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^a	Ссылки	Примечание
БД по физико-химическим свойствам высокочистых веществ	Институт химии высокочистых веществ РАН (Institute of Chemistry of High-Purity Substances of the Russian Academy of Sciences)	Россия	—	46, 99, 100	Физико-химические свойства высокочистых веществ, определяющие эффективность процессов очистки; информация о коэффициентах распределения примеси при двухфазных равновесиях
«EMIS» — библиографическая БД по полупроводниковым и другим материалам электронной техники	Институт инженеров-электриков (Institute of Electrical Engineers)	Англия	—	См. ^c	
«MRMD» — БД по свойствам материалов, применяемых в микроэлектронике	Информационный центр численного анализа и синтеза Университета Пурдью (Center for Information and Numerical Data Analysis and Synthesis of Purdue University)	США	https://cindasdata.com/	37	Данные о физических и физико-химических свойствах материалов, применяемых в микроэлектронике
«ЭПИДИФ» — БД по коэффициентам взаимной диффузии компонентов газовой фазы эпитаксии полупроводниковых материалов	Объединенный институт высоких температур РАН (Joint Institute for High Temperatures of RAS)	Россия	—	101	
«WebHTS» — БД по высокотемпературным сверхпроводникам	Национальный институт стандартов и технологий (National Institute of Standards and Technology)	США	www.ceramics.nist.gov/srd/hts/htsquery.htm	См. ^b	
«SUPERCON» — БД по свойствам сверхпроводников	Национальный исследовательский институт металлов (National Research Institute for Metals) (входит в систему баз данных National Institute of Materials Science)	Япония	http://supercon.nims.go.jp/English.html	102	
БД по технике высоких магнитных полей и криогенике	Национальный институт материаловедения (National Institute of Materials Science)	Япония	http://yuutsuzu.nims.go.jp/index_eng.html	См. ^c	Данные о теплопроводности, электропроводности и сверхпроводящих свойствах веществ при низких температурах
«ACDB» — БД по керамикам	Университет Циньхуа (Tsinghua University)	Китай	—	См. ^c	Данные о механических и физических свойствах нитрида кремния и диоксида циркония
«NISTCERAM» — БД по керамикам	Национальный институт стандартов и технологий (National Institute of Standards and Technology)	США	www.ceramics.nist.gov/srd/scd/scdquery.htm	См. ^b	Данные о теплофизических, механических, коррозионных свойствах пористости керамических материалов

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^a	Ссылки	Примечание
БД по функциональным керамическим материалам	Лондонский университетский колледж, Лондонский империял-колледж, Лондонский университет, Региональная исследовательская лаборатория (University College London, Imperial College London, University of London, Regional Research Laboratory)	Англия, Индия	http://db.foxd.org	103	Данные о диэлектрической проницаемости, ионной диффузии оксидов и других электрокерамических материалов. Оснащена программами data mining, которые используются для оценки параметров материалов
«CERAB» — библиографическая БД по свойствам керамик	Фирма «Cambridge Scientific Abstracts» (Cambridge Scientific Abstracts)	США	—	См. ^d	Доступна в сети STN
БД по ИК-спектрам	Национальный институт стандартов и технологий (National Institute of Standards and Technology)	США	www.nist.gov/srd/nist35.htm	См. ^b	
«C and HTC-DATA» — БД по покрытиям и высокотемпературной коррозии	Университет Прованса (Universite de Provence)	Франция	—	104	
«АВОГАДРО» — БД для расчетов в области физико-химической газодинамики	Институт механики Московского университета им. М.В.Ломоносова (Institute of Mechanics of Lomonosov Moscow State University)	Россия	—	105	
«DIPPR» — комплекс БД по свойствам промышленных веществ	Проектный институт данных о физических свойствах (Design Institute for Physical Property Data)	США	http://dippr.byu.edu/	73–77	Свойства промышленных веществ, зависящие от температуры
«РАДЕН» — БД по радиационным и энергетическим характеристикам двухатомных молекул	Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова (M.V.Lomonosov Moscow State University)	Россия	www.elch.chem.msu.ru/cgi-bin/raden/raden.cgi	106	
Gmelin-Online Datensystem	Институт неорганической химии Гмелина (Gmelin Institute for Inorganic Chemistry)	Германия	—	107	Физико-химические свойства неорганических и металлоорганических соединений. Доступна в сети STN
«MOGADOC» — библиографическая БД по свойствам веществ, находящихся в газовой фазе	Университет Ульма (University of Ulm)	Германия	www.uni-ulm.de/strudo/mogadoc/	108–110	Библиография по структурным, электрическим и магнитным свойствам, электронным и микроволновым спектрам неорганических, элементоорганических и органических веществ, находящихся в газовой фазе

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^a	Ссылки	Примечание
«ASMDATA» — БД по свойствам материалов	Американское общество металлов (American Society for Metals)	США	http://asmcommunity.asminternational.org/portal/site/www/MatInformation/OnlineDatabase	См. ^d	Данные о коррозионных, механических, физических и др. свойствах композитов, сталей, металлов, цветных сплавов и пластиков
«COPPERDATA» — библиографическая БД по свойствам меди и ее сплавов	Корпорация «Copper Development Association» (Copper Development Association Inc.)	США	www.csa.com/copperdata	См. ^d	Данные о механических, электрических, коррозионных и термических свойствах меди и ее сплавов
Информационная система по редкоземельным металлам	Чангчунский институт прикладной химии Китайской академии (Changchun Institute of Applied Chemistry of Academia Sinica)	Китай	—	111	Данные о физико-химических свойствах редкоземельных металлов и параметрах процессов экстракции
БД по аморфным материалам	Университет Тохоку (Tohoku University)	Япония	—	112	
HYDROGENE DATA — БД по свойствам материалов, содержащим водород	Национальный центр научных исследований/Центр изучения химической металлургии (Centre National de la Recherche Scientifique/Centre d Etudes de Chimie Metallurgique)	Франция	—	113	Данные о механических, электрических, электрохимических, магнитных свойствах материалов с водородом, данные по диффузии, растворимости водорода, накопителях водорода, влиянии поверхности, механической и термической обработки, структуре и т.д.
«NRIM CDS» — БД по ползучести	Национальный исследовательский институт металлов (National Research Institute for Metals)	Япония	—	См. ^c	Данные о ползучести, разрыве, прочности сталей и сплавов
«MATADOR» — БД по механическим и физическим свойствам черных и цветных металлов	Объединение моторов и турбин (Motoren und Turbinen Union München GmbH)	Германия	—	См. ^c	
«DMPME» — БД по механическим свойствам промышленных материалов	Шанхайский исследовательский институт материалов (Shanghai Research Institute of Materials)	Китай	—	См. ^c	Механические (включая усталостные), физические, коррозионные и другие свойства черных и цветных металлов, сталей и пластмасс
«AAASD» — БД по свойствам и спецификациям алюминиевых сплавов	Корпорация «Алюминиевая ассоциация» (Aluminum Association Inc.)	США	—	См. ^c	
«nSOFT FATIMAS MDM» — БД по усталости и трещинообразованию	Фирма «nCode International» (nCode International Ltd.)	Англия	www.ncode.com	См. ^c	

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^a	Ссылки	Примечание
«CETIM-BDM» — БД по физическим и механическим свойствам промышленных материалов	Технический центр промышленности центра информационных технологий (Centre Technique des Industries Mecaniques Centre d Information Technologique)	Франция	—	См. ^c	Данные о механических и физических свойствах черных и цветных металлов, сталей, композитов
«SciGlass» — БД по составу и свойствам стекол	Компания «Термотех» (Thermex Company, ITC Inc.)	Россия	www.sciglass.info	114–117	Данные о механических, оптических, электрических свойствах стекол и фазовых диаграммах
«INTERGLAD» — БД по составу и свойствам стекла	New Glass Forum	Япония	http://61.194.5.20/interglad6/index.html	118	То же
БД по прочности материалов	Национальный исследовательский институт металлов, Японский информационный центр в области науки и техники (National Research Institute for Metals, Japan Information Center of Science and Technology)	Япония	—	См. ^c	Данные о прочности сталей, сплавов и металлов
«MAT-DB» — БД по механическим и физическим свойствам промышленных сплавов	Объединенный исследовательский центр Европейской комиссии — Институт энергетики (Joint Research Centre of the European Commission — Institute for Energy)	Нидерланды	—	119, 120	Данные о механических, физических, коррозионных свойствах покрытий, сплавов, керамик
БД по свойствам оптических материалов	Национальная лаборатория Сандия (Sandia National Laboratory)	США	—	См. ^c	
«FASMET» — БД по усталостной прочности металлических материалов	Университет Рицумейкан (Ritsumeikan University)	Япония	—	См. ^c	
«CRAMET» — БД по росту усталостных трещин в металлических материалах	То же	»	—	См. ^c	
«Fatigue DB» — БД по усталости сталей	Национальный институт материаловедения (National Institute of Materials Science)	»	https://tsuge.nims.go.jp/top/fatigue.html	См. ^c	
«MSDRD» — БД по прочности материалов	Университет Рицумейкан (Ritsumeikan University)	»	—	См. ^c	Данные о механических свойствах керамик, композитов, металлов
«JSSR DB» — БД по пружинам	Национальный исследовательский институт металлов (National Research Institute for Metals)	»	—	См. ^c	

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^a	Ссылки	Примечание
«ALFRAC» — БД по механическим свойствам алюминиевых сплавов	Совет по свойствам материалов, корпорация «Алюминиевая ассоциация», Национальный институт стандартов и технологий (The Materials Properties Council, Aluminum Association, Inc., National Institute of Standards and Technology)	США	—	См. ^d	Данные о прочности на разрыв и излом при плоских деформациях и надрезах для 32 алюминиевых сплавов
«MARTUF» — БД по свойствам сталей, применяемых в судостроении	Совет по свойствам материалов (The Materials Properties Council)	»	—	См. ^d	Данные о механических, коррозионных и прочих свойствах сталей
«MDF» — БД по свойствам сплавов черных и цветных металлов	Фирма «Cambridge Scientific Abstracts» (Cambridge Scientific Abstracts)	»	—	См. ^d	Доступна в сети STN
«METALCREEP» — БД по ползучести и разрушающему напряжению алюминиевых сплавов и сталей	Национальная сеть данных по материалам (National Materials Property Data Network Inc.)	»	—	См. ^d	
«SPTD1» — БД по структурным фазовым переходам	Институт низкотемпературных и структурных исследований Польской Академии наук (Institute of Low Temperature and Structural Research of PAN)	Польша	—	121	
«ICSDb» — БД по структуре несоизмерных фаз	Университет Па Васко (Universidad del Pais Vasco)	Испания	www.cryst.ehu.es/icsdb/about.html		
БД по несоизмерным фазам	Католический университет Лоувейна (Universite Catholique de Louvain)	Бельгия	www.mapr.ucl.ac.be/~crystal/index.html	122	
«CompoTherm» — БД и система прогноза теплофизических свойств композитов	Национальный институт материаловедения (National Institute of Materials Science)	Япония	http://composite.nims.go.jp	78	Данные о теплофизических, термодинамических, механических свойствах композитов
Система БД по электронной структуре	Японская научно-техническая корпорация, Национальный институт материаловедения (Japan Science and Technology Corporation, National Institute of Materials Science)	»	http://caldb.nims.go.jp/	См. ^e	
«CCT DB» — БД по сварке	То же	»	http://inaba.nims.go.jp/Weld	См. ^e	
«Data-Free-Way» — БД по ядерным материалам	Национальный институт материаловедения (National Institute for Materials Science)	»	http://dfw.nims.go.jp	123–125	

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Адрес в сети Интернет ^a	Ссылки	Примечание
БД по механическим свойствам	Национальный институт материаловедения, Японский научно-исследовательский институт атомной энергии, Японский институт по переработке ядерного топлива (National Institute of Materials Science, Japan Atomic Energy Research Institute, Japan Nuclear Cycle Development Institute)	Япония	http://tsuge.nims.go.jp	См. ^е	
Система БД по материалам для сосудов высокого давления	Национальный институт материаловедения (National Institute of Materials Science)	Япония	http://pvmdb.nims.go.jp/index_eng.html	См. ^е	
БД по диффузии	То же	»	http://diffusion.nims.go.jp/index_eng.html	См. ^е	
БД по нанокompозитам	Российский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева (D.I.Mendeleev University of Chemical Technology of Russia)	Россия	—	126	

^a Адреса БД в сети Интернет даны по состоянию на декабрь 2009 г. ^b Информация сайта Национального института стандартов и технологий США (<http://www.nist.gov>). ^c Информация сайта CODATA (www.codata.org). ^d Информация сайта STN (www.stn.com). ^e БД Национального института материаловедения (NIMS) (Япония) (http://mits.nims.go.jp/db_top_eng.htm).

Литература

- М.Хансен, К.Андерко. *Структуры двойных сплавов*. Металлургия, Москва, 1962
- Физико-химические свойства полупроводниковых веществ. (Справочник). (Под ред. А.В.Новоселовой, В.Б.Лазарева). Наука, Москва, 1979
- Физико-химические свойства элементов. Справочник. (Под ред. Г.В.Самсонова). Наукова думка, Киев, 1965
- Р.П.Эллиот. *Структуры двойных сплавов*. Изд-во иностр. лит-ры, Москва, 1970
- Ф.Шанк. *Структуры двойных сплавов*. Металлургия, Москва, 1973
- Binary Alloy Phase Diagrams. Vols 1, 2.* (Ed. Т.В.Massalski). ASM Int.; Materials Park, Ohio, 1990
- Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases. Vol. 3.* (Esd P.Villars, L.D.Calvert). American Society for Metals; Metals Park, OH, 1985
- Н.А.Торопов, В.П.Барзаковский, В.В.Лапин, Н.Н.Курцева. *Диаграммы состояния силикатных систем. Справочник. Вып. 1. Двойные системы*. Наука, Москва; Ленинград, 1965
- Л.Ф.Григорьева, Г.И.Косулина, М.А.Петрова, А.И.Сечной. *Диаграммы состояния систем тугоплавких оксидов. Справочник. Вып. 6. Системы керамических высокотемпературных сверхпроводников*. (Под ред. Р.Г.Гребенщикова). Наука, Санкт-Петербург, 1997
- G.Effenberg. In *The 6th International Scholl-Conference «Phase Diagrams in Materials Science». 14–20 October, 2001. (Technical Program and Abstracts)*. National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2001. P. 1
- Intelligent Multimedia Information Retrieval.* (Ed. M.T.Maybury). AAAI Press; The MIT Press; Menlo Park, CA, Cambridge, MA, 1997
- P.Villars, M.Berndt, K.Brandenburg, K.Cenzual, J.Daams, F.Hulliger, T.Massalski, H.Okamoto, K.Osaki, A.Prince, H.Putz, S.Iwata. *J. Alloys Compd.*, **367**, 293 (2004)
- Н.Н.Киселева. *Компьютерное конструирование неорганических соединений. Использование баз данных и методов искусственного интеллекта*. Наука, Москва, 2005
- В.С.Земсков, Н.Н.Киселева, Н.Н.Киселев, В.В.Петухов, Е.А.Черемушкин, Л.Е.Шелимова, Н.В.Кравченко, И.Н.Белокурова. *Неорг. матер.*, **31**, 1198 (1995)
- Ю.И.Христофоров, В.В.Хорбенко, Н.Н.Киселева, В.В.Подбельский, И.Н.Белокурова, В.С.Земсков. *Изв. вузов. Материалы электронной техники*, (4), 50 (2001)
- В.А.Дударев, Н.Н.Киселева, В.С.Земсков. *Перспективные материалы*, (5), 20 (2006)
- N.Kiselyova, S.Iwata, V.Dudarev, I.Prokoshev, V.Khorbenko, V.Zemskov. *Int. J. Inform. Technol. Knowledge*, **2**, 366 (2008)
- Е.М.Савицкий, Н.Н.Киселева, Б.Н.Пищик, Н.В.Кравченко, М.С.Голикова. *Докл. АН СССР*, **279**, 627 (1984)
- Н.В.Юдина, В.В.Петухов, Е.А.Черемушкин, Н.Н.Киселева, В.С.Земсков. *Кристаллография*, **41**, 490 (1996)
- Н.Киселева, Д.Мурат, А.Столяренко, В.Дударев, В.Подбельский, В.Земсков. *Информ. рес. России*, (4), 21 (2006)
- Ю.И.Дегтярев, В.В.Подбельский, Н.Н.Киселева, В.В.Петухов, О.В.Шеханова, А.А.Буш, И.Н.Белокурова, В.А.Пушко. *Изв. вузов. Матер. электрон. техн.*, (3), 35 (1999)
- Н.Н.Киселева, И.В.Прокошев, В.А.Дударев, В.В.Хорбенко, И.Н.Белокурова, В.В.Подбельский, В.С.Земсков. *Неорг. матер.*, **42**, 380 (2004)
- World Databases in Chemistry (World Databases Ser.)*. (Ed. C.J.Armstrong). Bowker-Saur, New Jersey, 1996
- Л.В.Гурвич. *Вестн. АН СССР*, (3), 54 (1983)
- G.V.Belov, V.S.Iorish, V.S. Yungman. *CALPHAD*, **23**, 173 (1999)
- М.С.Трахтенгерц. *Научно-технич. информация. Сер. 2. Информ. процессы и системы*, (6), 30 (2006)
- М.С.Трахтенгерц. *Научно-технич. информация. Сер. 2. Информ. процессы и системы*, (7), 28 (2006)
- В.Ю.Зицерман, Г.А.Кобзев, Л.Р.Фокин. В кн. *Теплогидравлические аспекты безопасности АЭУ с реакторами на быстрых нейтронах. Межотраслевая тематическая конференция. (Тез. докл.)*. ФЭИ, Обнинск, 2005. С. 87
- P.Wang, D.B.Neumann. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **29**, 31 (1989)
- NIST Standard Reference Database 88. NIST/TRC Ideal Gas Database. Version 2.0. Users' Guide*. NIST, Gaithersburg, 2006
- J.G.Kaufman, V.J.Drago. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, (1), 335 (1993)
- M.W.Chase, C.A.Davies, J.R.Downey, D.J.Frurip, R.A.McDonald, A.N.Syverud. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **14**, 1 (1985)
- B.Cheyne. *CODATA Bull.*, **58**, 18 (1985)
- P.J.Spencer. *Z. Metallknd.*, **87**, 535 (1996)
- A.T.Dinsdale. *CALPHAD*, **15**, 317 (1991)
- J.-O.Andersson, B.Jansson, B.Sundman. *CODATA Bull.*, **58**, 31 (1985)
- B.Sundman, B.Jansson, J.-O.Andersson. *CALPHAD*, **9**, 153 (1985)
- J.-O.Andersson, T.Helander, L.Hoglund, P.Shi, B.Sundman. *CALPHAD*, **26**, 273 (2002)
- R.H.Davies, A.T.Dinsdale, J.A.Gisby, J.A.J.Robinson, S.M.Martin. *CALPHAD*, **26**, 229 (2002)
- Z.Huang, P.P.Conway, R.C.Thomson, A.T.Dinsdale, J.A.J.Robinson. *CALPHAD*, **32**, 129 (2008)
- U.Westhaus, T.Droge, R.Sass. *Fluid Phase Equil.*, **158–160**, 429 (1999)
- C.Y.Ho, H.H.Li. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **33**, 36 (1993) H.Yokokawa, S.Yamauchi, T.Matsumoto. *Themochim. Acta*, **245**, 45 (1994)
- H.Yokokawa, S.Yamauchi, T.Matsumoto. *CALPHAD*, **26**, 155 (2002)
- C.W.Bale, P.Chartrand, S.A.Degterov, G.Eriksson, K.Hack, R.Ben Mahfoud, J.Melancon, A.D.Pelton, S.Petersen. *CALPHAD*, **26**, 189 (2002)
- В.С.Земсков, Ф.А.Кузнецов, В.Б.Уфимцев. *Изв. вузов. Матер. электрон. техн.*, (3), 13 (1998)
- I.Ohnuma, X.J.Liu, H.Ohtani, K.Ishida. *J. Electron. Mater.*, **28**, 1164 (1999)
- X.J.Liu, I.Ohnuma, C.P.Wang, R.Kainuma, K.Ishida, M.Ode, T.Koyama, H.Onodera, T.Suzuki. *J. Electron. Mater.*, **32**, 1265 (2003)
- X.J.Liu, K.Oikawa, I.Ohnuma, R.Kainuma, K.Ishida. *JOM*, **55**, 53 (2003)
- P.Villars, N.Onodera, S.Iwata. *J. Alloys Compd.*, **279**, 1 (1998)
- TAPP Database. Version 2.1*, ESM Software Inc., Hamilton, USA, 1991–1994
- G.Bergerhoff, R.Hundt, R.Sievers, I.D.Brown. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **23**, 66 (1983)
- G.Bergerhoff. *Comp. Phys. Commun.*, **33**, 79 (1984)
- E.Fluck. *J. Res. NIST*, **101**, 217 (1996)
- A.Belsky, M.Hellenbrandt, V.L.Karen, P.Luksch. *Acta Crystallogr., Sect. B*, **58**, 364 (2002)
- M.Hellenbrandt. *Crystallogr. Rev.*, **10**, 17 (2004)
- R.Allmann, R.Hinek. *Acta Crystallogr., Sect. A*, **63**, 412 (2007)
- M.J.Carr, W.F.Chambers, D.Melgaard, V.L.Himes, J.Stalick, A.D.Mighell. *J. Res. NIST*, **94**, 15 (1989)
- A.D.Mighell, V.L.Karen. *J. Res. NIST*, **101**, 273 (1996)
- D.R.Denley, H.V.Hart. *J. Appl. Crystallogr.*, **35**, 546 (2002)
- H.V.Hart. *J. Appl. Crystallogr.*, **35**, 552 (2002)
- S.K.Byram, C.F.Campagna, J.Fait, R.A.Sparks. *J. Res. NIST*, **101**, 295 (1996)
- G.H.Wood, J.R.Rodgers, S.R.Gough. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **33**, 31 (1993)
- G.H.Wood, J.R.Rodgers, S.R.Gough, P.Villars. *J. Res. NIST*, **101**, 205 (1996)

64. P.S.White, J.R.Rodgers, Y.Le Page. *Acta Crystallogr., Sect. B*, **58**, 343 (2002)
65. А.В.Чичагов, А.Б.Белоножко, А.Л.Лопатин, Т.Н.Докина, О.Л.Самохвалова, Т.В.Ушаковская, З.В.Шилова. *Кристаллография*, **35**, 610 (1990)
66. А.В.Чичагов, Д.А.Варламов. В кн. *Теория, история, философия и практика минералогии. (Матер. IV Междунар. минералогического семинара)*. Геопринт, Сыктывкар, 2006. С. 295
67. J.Faber, T.Fawcett. *Acta Crystallogr., Sect. B*, **58**, 325 (2002)
68. S.N.Kabekkodu, J.Faber, T.Fawcett. *Acta Crystallogr., Sect. B*, **58**, 333 (2002)
69. F.H.Allen, J.E.Davies, J.J.Galloy, O.Johnson, O.Kennard, C.F.Macrae, E.M.Mitchell, G.F.Mitchell, M.Smith, D.G.Watson. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **31**, 187 (1991)
70. D.G.Watson. *J. Res. NIST*, **101**, 226 (1996)
71. F.H.Allen. *Acta Crystallogr., Sect. B*, **58**, 385 (2002)
72. E.Buck, E.M.Frankl. *Chem. Eng. Progr.*, **80**, 82 (1984)
73. D.A.Palmer. *AIChE Symp. Ser.*, **86**, 1 (1990)
74. Q.Dong, A.K.R.Dewan, K.N.Marsh. *Int. J. Thermophys.*, **202**, 237 (1999)
75. G.H.Thomson, A.H.Larsen. *J. Chem. Eng. Data*, **41**, 930 (1996)
76. W.V.Wilding, R.L.Rowley, J.L.Oscarson. *Fluid Phase Equil.*, **150–151**, 413 (1998)
77. Y.Xu, M.Yamazaki, H.Wang, K.Yagi. *Mater. Trans.*, **47**, 1882 (2006)
78. Н.Н.Киселева, Н.В.Кравченко, В.В.Петухов. *Неорг. матер.*, **32**, 636 (1996)
79. R.Kimball, J.Caserta. *The Data Warehouse ETL Toolkit: Practical Techniques for Extracting, Cleaning, Conforming, and Delivering Data*. Wiley, UK, 2004
80. V.Kornyushko, V.Dudarev. *Int. J. Inform. Theor. Applic.*, **12**, 121 (2006)
81. J.P.Morgenthal. *Enterprise Information Integration: a Pragmatic Approach*. Lulu.com, Morrisville, 2005
82. J.P.Morgenthal. *Enterprise Applications Integration with XML and Java*. Prentice Hall PTR, New York; Sydney; London, 2000
83. N.Kiselyova, A.Stolyarenko, V.Ryazanov, V.Podbel'skii. *Int. J. Inform. Theor. Applic.*, **15**, 345 (2008)
84. В.В.Корнеев, А.Ф.Гареев, С.В.Васютин, В.В.Райх. *Базы данных. Интеллектуальная обработка информации*. Издатель Молгачева С.В., Москва, 2001
85. Г.С.Бурханов, Н.Н.Киселева. *Успехи химии*, **78**, 615 (2009)
86. Ю.И.Журавлев, В.В.Рязанов, О.В.Сенько. *«Распознавание». Математические методы. Программная система. Практические применения*. ФАЗИС, Москва, 2006
87. В.П.Гладун. *Процессы формирования новых знаний*. Педагог, София, 1995
88. В.К.Kim, Y.M.Rhyim. In *Proceedings of the International Symposium on Materials Database (MITS 2008)*. NIMS, Tsukuba, 2008. P. 68
89. M.Yamazaki. In *Proceedings of the International Symposium on Materials Database (MITS 2009)*. NIMS, Tsukuba, 2009. P. 7
90. Y.Xu. In *Proceedings of the International Symposium on Materials Database (MITS 2009)*. NIMS, Tsukuba, 2009. P. 4
91. M.Gaune-Escard, J.-P.Bros, Y.Fouque, P.Gaune, G.Hatem, P.Juhem. *Metaux*, **64**, 208 (1988)
92. A.M.Zahra, C.Y.Zahra, R.Castanet, G.Jaroma-Weiland, G.Neuer. *J. Therm. Anal.*, **38**, 781 (1992)
93. E.Östholts, H.Wanner. *The NEA Thermochemical Data Base Project*. OECD Nuclear Energy Agency, Issy-les-Moulineaux, 2000
94. T.Baba, Y.Yamashita, A.Nagashima. *J. Chem. Eng. Data*, **54**, 2745 (2009)
95. A.D.Pelton. *Rare Met.*, **25**, 473 (2006)
96. M.A.Van Hove, K.Hermann, P.R.Watson. *Acta Crystallogr., Sect. B*, **58**, 338 (2002)
97. С.А.Магарилл, С.В.Борисов, Н.В.Подберезская, Е.Н.Ипатова, В.А.Титов, Ф.А.Кузнецов. *Журн. структ. химии*, **36**, 559 (1995)
98. Г.Г.Девярых, И.Д.Ковалев, В.А.Крылов, К.К.Малышев, Л.И.Осипова. *Изв. вузов. Матер. электр. техн.*, (3), 44 (1998)
99. Г.Г.Девярых, Ю.А.Карпов, Л.И.Осипова. *Выставка-коллекция веществ особой чистоты*. Наука, Москва, 2003
100. L.Fokin, V.Popov, A.Kalashnikov, L.Zarkova, P.Pirgov, I.Petkov. *Int. J. Thermophys.*, **22**, 1497 (2001)
101. Y.Asada, E.Nakada, T.Yokokawa, Y.Kurihara, A.Yoshikawa. *J. Mater. Sci. Soc. Jpn.*, **24**, 199 (1988)
102. D.J.Scott, S.Manos, P.V.Coveney, J.C.H.Rossiny, S.Fearn, J.A.Kilner, R.C.Pullar, N.McN.Alford, A.-K.Axelsson, Y.Zhang, L.Chen, S.Yang, J.R.G.Evans, M.T.Sebastian. *J. Chem. Inf. Model.*, **48**, 449 (2008)
103. S.Komornicki, R.Streiff. *J. Phys. IV*, **3**, 1013 (1993)
104. Э.А.Ковач, С.А.Лосев, А.Л.Сергиевская. *Металлы*, (4), 70 (1993)
105. Л.А.Кузнецова, Е.А.Пазюк, А.В.Столяров. В кн. *Химия МГУ*. МГУ, Москва, 1994. С. 53
106. A.Nebel, U.Tolle, R.Maass, G.Olbrich, R.Deplanque, P.Lister. *Anal. Chim. Acta*, **265**, 305 (1992)
107. A.Lohr, B.Mez-Starck, H.-G.Schirdewahn, D.-G.Watson. *J. Mol. Struct.*, **97**, 57 (1983)
108. J.Vogt. *J. Mol. Spectrosc.*, **155**, 249 (1992)
109. J.Vogt, B.Mez-Starck, N.Vogt, W.Hutter. *J. Mol. Struct.*, **485–486**, 249 (1999)
110. L.Xu, G.Li, S.Wang, H.Lu, H.Wang, C.Hu, X.Jiang, Y.Xiao, Y.Xiao, X.Lu. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **31**, 375 (1991)
111. T.Nakanomyo, Y.Akiyama, T.Itoh, S.Wada, N.Mori, A.P.Tsai, Y.Kawazoe. *Sci. Repts. Res. Inst. Tohoku Univ.*, **37**, 228 (1992)
112. S.Talbot-Besnard, M.Rubinstein, C.Droniou. *Ann. Chim. (France)*, **13**, 611 (1988)
113. A.I.Priven, O.V.Mazurin. *Adv. Mater. Res.*, **39–40**, 147 (2008)
114. O.V.Mazurin. *J. Non-Cryst. Solids*, **351**, 1103 (2005)
115. O.V.Mazurin, Yu.Gankin. *J. Non-Cryst. Solids*, **342**, 166 (2004)
116. О.В.Мазурин, В.В.Гусаров. *Физика и химия стекла*, **28**, 74 (2002)
117. T.Saitou, H.Oguro, T.Fukami, T.Iseda. In *Proceedings of the Japan Society of Information and Knowledge*. 1999. P. 63
118. M.Nagy, H.H.Over, E.Wolfart. *Data Sci. J.*, **4**, 151 (2005)
119. H.H.Over, E.Wolfart, W.Dietz, L.Toth. *Adv. Eng. Mater.*, **7**, 766 (2005)
120. V.Janovec, P.E.Tomaszewski, L.Richterova, J.Fabry, Z.Kluiber. *Ferroelectrics*, **301**, 169 (2004)
121. R.Caracas. *J. Appl. Crystallogr.*, **35**, 120 (2002)
122. H.Tsuji, N.Yokoyama, M.Fujita, Y.Kurihara, S.Kano, Y.Tachi, K.Shimura, R.Nakajima, S.Iwata. *J. Nucl. Mater.*, **271–272**, 486 (1999)
123. Y.Kaji, Y.Miwa, T.Tsukada, H.Tsuji, H.Nakajima. *J. Nucl. Sci. Techn.*, **37**, 949 (2000)
124. Y.Kaji, H.Tsuji, M.Fujita, Y.Xu, K.Yoshida, S.Mashiko, K.Shimura, S.Miyakawa, T.Ashino. *Data Sci. J.*, **3**, 88 (2004)
125. Е.Василенко, Т.Мещерякова, Ф.Бацылев, Е.Порысева. *Информ. рес. России*, (4), 5 (2009)

COMPUTER INFORMATION RESOURCES IN INORGANIC CHEMISTRY AND MATERIALS SCIENCE

N.N.Kiselyova, V.A.Dudarev, V.S.Zemskov

*A.A.Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of Russian Academy of Sciences
49, Leninsky prosp., 119991 Moscow, Russian Federation, Fax +7(499)135-8680*

The information systems used in inorganic chemistry and materials science are considered. The following basic trends in the development of the state-of-the-art information systems in these areas are highlighted: an access to information via Internet, merging of the documental and factual databases, the involvement of experts for the evaluation of the reliability of the data, the instrumentation of the databases with equipment for the information analysis, integration of the databases according to the properties of the inorganic substances and materials.

Bibliography — 126 references.

Received 14th September 2009