

УДК 546:025.4.03

Н. Н. Киселева, д-р хим. наук, зав. лаб.,
В. А. Дударев, канд. техн. наук, ст. науч. сотр.
Учреждение Российской академии наук
Институт металлургии и материаловедения
им. А. А. Байкова РАН
e-mail: kis@imet.ac.ru

База данных "Информационные ресурсы неорганической химии и материаловедения"

Разработана база данных IRIC — *Information Resources of Inorganic Chemistry*, содержащая информацию о компьютерных информационных ресурсах в области неорганической химии и материаловедения, доступная пользователям глобальной сети Интернет (<http://iric.imet-db.ru>). БД содержит информацию об организациях-владельцах (название, страна, почтовый и электронный адреса, телефон и т. д.), ключевые слова, по которым возможен поиск, а также ссылки на публикации. В настоящее время БД содержит сведения о более 100 информационных системах. БД IRIC предназначена для навигации специалистов в море информационных ресурсов в вышеуказанных предметных областях. БД IRIC имеет две версии — русскоязычную и англоязычную.

Ключевые слова: база данных, информационные ресурсы в области неорганической химии и материаловедения, Интернет

Введение

Перед любым исследователем рано или поздно возникает проблема получения информации, необходимой для проведения научных работ. Для ее решения в настоящее время в мире созданы и эксплуатируются множество баз данных (БД) по свойствам неорганических веществ и материалов (БД СНВМ) [1—8]. Только за пять последних лет число БД в этих предметных областях возросло более чем в 2 раза. Большинство разработанных систем являются фактографическими, хотя объем информации в области неорганических веществ и материалов, содержащейся в документальных БД (*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), *ВИНИТИ* (www2.viniti.ru), *e-library* (www.elibrary.ru) и т. д.), значительно превосходит суммарный объем данных фактографических систем.

Очевидно, что ни одна из созданных в мире БД СНВМ не содержит полного описания свойств веществ и материалов. На современном этапе развития науки и промышленности зачастую только исчерпывающая характеристика материала позволяет принять решение об его использовании, поскольку специалистам в области материаловедения требуется знание самых разных параметров веществ. Однако всесторонний анализ свойств того или иного вещества нередко является затруднительным по причине разбросанности информации по различным источникам. Таким образом, для получения полной информационной картины нередко приходится проводить поиск сразу в нескольких БД СНВМ, содержащих разрозненные данные. Традиционной проблемой последних лет стала проблема поиска БД, содержащих нужные для специалистов данные. Для решения этой проблемы в Институте металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН (ИМЕТ РАН) разработана справочная БД "Информационные ресурсы неорганической химии и материаловедения" — *Information Resources of Inorganic Chemistry* (IRIC).

1. Структура базы данных IRIC

При разработке концептуальной структуры БД (рис. 1) учитывались возможные запросы потенциальных пользователей. Основное внимание было уделено формированию двуязычного (на русском и английском языках) постоянно пополняемого списка ключевых слов, а также уточнению информации об организациях-владельцах БД (название, почтовый и электронный адреса, телефон, факс, *e-mail*). Большинство данных было извлечено из публикаций и Интернета. В результате нормализации структуры БД были сформированы 13 реляционных таблиц (рис. 1).

Основная таблица БД IRIC — **Databases** — содержит идентификатор БД, полное и сокращенное названия БД СНВМ и комментарии на русском и английском языках, номера телефонов и факсов, *e-mail* организации-владельца БД, а также ее адрес в сети Интернет. Таблица **KeywordsInfo**

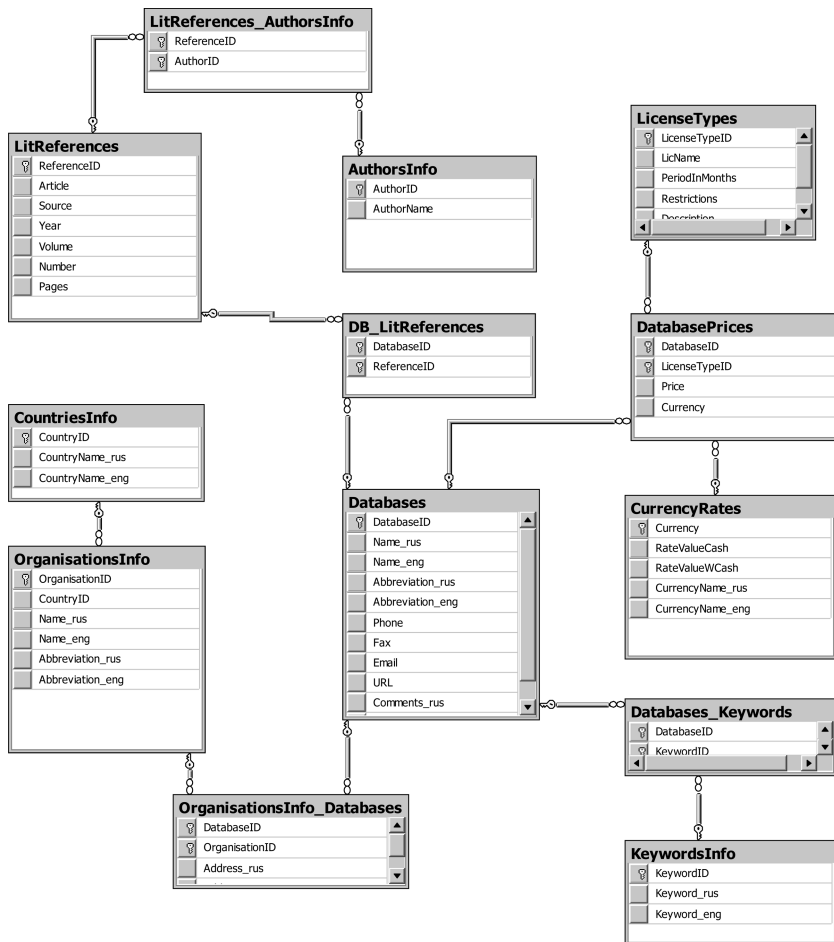


Рис. 1. Структура БД IRIC

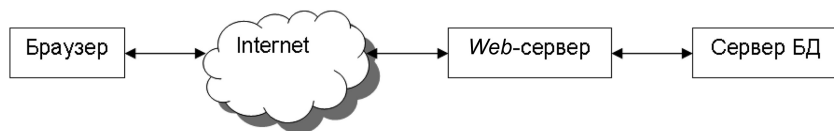


Рис. 2. Трехзвенная архитектура построения Web-приложений

включает список ключевых слов, отражающих содержание БД СНВМ, на русском и английском языках. В таблице **CountriesInfo** дан список стран, в которых разработаны БД СНВМ, на русском и английском языках. Таблица **OrganisationsInfo** включает данные об организациях—владельцах БД СНВМ: идентификатор организации-владельца; соответствующий идентификатор страны, в которой расположена организация; полное и сокращенное названия организации на русском (для российских организаций) и английском языках. В таблице **OrganisationsInfo_Databases** дано соответствие между идентификаторами БД СНВМ и организации-владельца, а также адрес организации на английском и русском (для российских организаций) языках. Соответствие между идентификаторами БД и ключевыми словами устанавливается

таблицей **Databases_Keywords**. Таблицы **LicenseTypes**, **DatabasePrices** и **CurrencyRates** включают информацию о типе лицензий и стоимости доступа к БД СНВМ.

Таблица **LitReferences** содержит основную информацию о публикациях, из которых почерпнута информация о БД СНВМ: номер статьи, ее название; название журнала (сборника, трудов и т. п.); год публикации, том, номер и страницы. В таблице **AuthorsInfo** дан пронумерованный список авторов публикаций. Соответствие между номерами статей и идентификаторами авторов устанавливается таблицей **References_AuthorsInfo**, а между номерами статей и идентификаторами БД СНВМ — таблицей **DB_LitReferences**.

Разработанная структура (рис. 1) позволяет обработать все возможные запросы пользователей, упрощает взаимодействие с БД и гарантирует непротиворечивость хранящихся данных. Ссылочная целостность обеспечивается использованием первичных и внешних ключей.

2. Пользовательский интерфейс БД IRIC

Для обеспечения наиболее простого доступа к БД IRIC со стороны конечных пользователей был разработан динамический *Web*-сайт, предоставляющий удобный пользовательский интерфейс для работы с базой данных. Сайт выполнен в качестве *Web*-приложения по классической трехзвенной архитектуре (на основе концепции "клиент-сервер"), включающей в себя три звена: браузер (клиент); *Web*-сервер (сервер приложений); сервер БД (рис. 2). БД IRIC доступна пользователям через сеть Интернет: <http://iric.imet-db.ru>. Для поиска информации в БД пригоден любой браузер. Информация предоставляется в открытом доступе на русском и английском языках, что открывает возможность использования БД широким кругом специалистов не только в нашей стране, но и за рубежом.

Просмотр и поиск информации о материальных ресурсах в БД IRIC осуществляется с помощью трех классов запросов:

- общий запрос — просмотр всей информации по выбранному разделу меню;
- простой запрос — поиск данных по одному критерию;

Google™ This page is in Russian. Translate it using Google Toolbar? [Learn more](#) Translate

IRIC
CHEMISTRY DATABASES
INFORMATION RESOURCES ON INORGANIC CHEMISTRY

Базы данных

Разработчики БД

Ключевые слова

Библиография

Сложные запросы

Карта сайта

Базы данных

Организация-разработчик: Показать все БД

Страна:

Название:

Аббревиатура:

Список баз данных
 Фильтр по организации-разработчику: Институт металлургии и материаловедения им.А.А.Байкова РАН (ИМЕТ РАН).
 Фильтр по стране: Россия.

№	Название (аббревиатура)	Контакты	Комментарий
1	БД по свойствам неорганических соединений (Фазы) [подробнее...]	Сайт: http://phases.imet-db.ru Тел: +74991352591 Факс: +74991358680 e-Mail: kis@ultra.imet.ac.ru	Термофизические, кристаллоструктурные и сверхпроводящие свойства неорганических соединений, образованных тремя и четырьмя элементами.
2	БД по фазовым диаграммам систем с полупроводниковыми фазами (Диаграмма)	Сайт: http://diag.imet-db.ru Тел: +74991352591	Фазовые диаграммы систем с полупроводниковыми соединениями, кристаллоструктурные и термодинамические свойства фаз.

Рис. 3. Пример сложного запроса к БД IRIC

- сложный запрос — поиск данных по нескольким критериям.

Примером сложного запроса является поиск материаловедческих БД, разработанных в определенной стране и организации. На рис. 3 показана часть результатов запроса для России и организации-разработчика ИМЕТ РАН.

3. БД IRIC как инструмент анализа основных тенденций в разработке информационных ресурсов в области неорганического материаловедения

Основная задача создания и эксплуатации баз данных — информационное обслуживание специалистов. Однако БД предоставляют значительно более широкие возможности оперирования информацией. Одной из таких возможностей является статистический анализ и выявление основных тенденций развития предметной области (в данном случае — информационные ресурсы неорганической химии и материаловедения).

Анализ тематики ключевых слов позволил выделить наиболее распространенные параметры неорганических веществ и материалов, информация о которых содержится в БД СНВМ (рис. 4, см. третью сторону обложки). Традиционное первое место по числу БД занимают фактографические информационные системы, аккумулирующие информацию по термодинамическим и теплофизическим свойствам. Интенсивно разрабатываются и широко используются в фундаментальных и прикладных исследованиях и промышленности БД с кристаллографической и кристаллохимиче-

ской информацией. В последние годы увеличилось число БД, содержащих сведения о механических свойствах (прочности, усталости, ползучести и т. д.) и электрических свойствах неорганических веществ и материалов.

Число компьютерных информационных ресурсов и их объем могут служить показателем научного и промышленного потенциала страны. Анализ информации БД IRIC позволил выявить страны-лидеры в области разработки материаловедческих информационных ресурсов. Мировой лидер — США — занимает первое место в списке разработчиков БД СНВМ (рис. 5, см. третью сторону обложки), главным образом за счет развития информационных систем *National Institute of Standards and Technology*. В последнее десятилетие Япония неуклонно наращивает объем информационных ресурсов (следует отметить вклад *National Institute of Materials Science* — основного японского провайдера в области материаловедческих БД). В тройку лидеров входит пока и Россия, главным образом за счет БД СНВМ академических институтов (ИМЕТ РАН, ИВТАН и т. д.).

Анализ информации БД IRIC, в том числе и предоставляемых ею полных текстов статей, позволил выявить и основные тенденции в области разработки и эксплуатации современных БД по свойствам неорганических веществ и материалов:

- доступ к информации из сети Интернет, который позволяет "доставить" необходимую и самую "свежую" информацию непосредственно на рабочее место химика или материаловеда;
- экспертная оценка хранящейся информации, для которой привлекаются высококвалифици-

рованные специалисты, что дает в руки пользователя не просто "сырую" информацию, а рекомендуемые значения;

- оснащение БД СНВМ средствами анализа информации — от традиционных термодинамических расчетов и статистических процедур до современных средств поиска закономерностей в данных, позволяющих прогнозировать поведение объектов и обеспечивающих принятие решений;
- интеграция БД по веществам и материалам в целях предоставления пользователю наиболее полной информации о свойствах конкретного вещества, а также для последующего анализа совокупной информации о веществах и материалах.

Заключение

Базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов являются высокотехнологичными продуктами современной науки. Неслучайно наибольшее число БД СНВМ разработано и эксплуатируется в наиболее развитых странах: США, Японии и других передовых государствах. Разработка БД СНВМ стимулируется следующими факторами: стремлением сократить затраты на необоснованное дублирование исследований и поиск информации; необходимостью получения достоверных и полных данных о свойствах веществ и материалов, а также развитием современных информационных технологий и, в первую очередь, Интернета.

В последние 10 лет резко возросло число БД для химиков и материаловедов, и этот процесс ускоряется с каждым годом. В связи с этим разработанная БД IRIC является удобным навигатором в море информационных ресурсов в области неорганической химии и материаловедения.

Созданная БД IRIC позволяет материаловедам не только получать информацию о существующих в мире БД по свойствам неорганических веществ

и технологиям их получения, но и проводить поиск таких БД по заданным ключевым словам. В последние годы наблюдается тенденция к кооперации в разработке БД и к интеграции уже созданных БД как на национальном, так и на международном уровнях. Это вызвано стремлением устранить дублирование работ и уменьшить затраты на разработку и поддержание БД. Создание БД IRIC как информационного ресурса, содержащего информацию о материаловедческих БД, является важным шагом на пути к созданию единой интегрированной материаловедческой информационной системы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, гранты № 09-07-00194, 08-07-00437 и 09-01-12060.

Список литературы

1. **Киселева Н. Н.** Компьютерное конструирование неорганических соединений. Использование баз данных и методов искусственного интеллекта. М.: Наука, 2005. 288 с.
2. **World Databases in Chemistry (World Databases Series.)** / Ed. C. J. Armstrong. New Jersey: Bowker-Saur, 1996. 1200 p.
3. **Baba T., Yamashita Y., Nagashima A.** Function Sharing and Systematic Collaboration between a Networking Database System and Printed Media on Thermophysical Properties Data // J. Chem. and Eng. Data. 2009. V. 54, N 9. P. 2745—2757.
4. **Земсков В. С., Кузнецов Ф. А., Уфимцев В. Б.** Банки данных по полупроводниковым и другим материалам электронной техники и процессам их получения // Изв. вузов. Материалы электронной техники. 1998. № 3. С. 13—16.
5. **Spencer P. J.** Development of thermodynamic databases and their relevance for the solution of technical problems // Z. Metallk. 1996. Bd. 87, N. 7. S. 535—539.
6. **Eriguchi K., Shimura K.** Factual Databases for Materials Design and Manufacturing // ISIJ Int. 1990. V. 30. N 6. P. 409—416.
7. **Kim B. K., Rhyim Y. M.** Materials database project in Korea // Proc. Int. Symp. on Materials Database (MITS 2008). July 17—18, 2008. Tsukuba, NIMS. 2008. P. 68—96.
8. **Begley E. F., Dapkunas S. J.** A Guide to Locating and Accessing Computerized Numeric Materials Databases // J. Materials Engineering and Performance. 1993. V. 2. N 6. P. 881—886.
9. **Дударев В. А.** База данных по информационным ресурсам в области неорганического материаловедения // VI Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов: сборник статей. М.: Интерконтакт-Наука, 2009. С. 127—129.