

А. Е. Поляков, аспирант Московского государственного университета тонких химических технологий

В. В. Мясютин, аспирант Московского государственного университета тонких химических технологий

В. А. Дударев, канд. техн. наук, доцент, старший научный сотрудник Института металлургии и материаловедения РАН, г. Москва

Компьютерное конструирование неорганических соединений на основе интегрированной информационной системы

В настоящее время существует огромное количество баз данных (БД) в различных предметных областях, что делает актуальной задачу рационального использования необходимой информации, содержащейся в них. Не является исключением и химическая отрасль. Статья посвящена развитию средств автоматизации исследований в этой отрасли.

Введение

Информация из БД может быть применена как для информационной поддержки, так и для формирования новых знаний, с целью выявления закономерностей, зависимостей и прогнозирования неизвестных значений параметров объекта, а также для обеспечения специалистов в области неорганических соединений высококачественной информацией о свойствах и методиках получения перспективных неорганических веществ. Современные тенденции таковы, что невозможно представить работу специалистов в какой-либо области без использования специализированных информационных систем (ИС), осуществляющих удаленный доступ через Интернет. Разработка ИС в области неорганических соединений и материаловедения ведется во всех развитых странах. Одним из крупнейших разработчиков в России является Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова (ИМЕТ РАН).

Базы данных в области неорганической химии и материаловедения ИМЕТ РАН

База «Кристалл» (<http://crystal.imet-db.ru>) содержит экспериментальные данные о свойствах акустооптических, электрооптических и нелинейнооптических веществ, погрешностях, методах измерений, условиях получения и т. д. Существенно, что основная часть информации базы данных собрана и оценена российскими специалистами, непосредственно участвующими в разработке и использовании химических соединений, относящихся к этим классам веществ. Информация по свойствам каждого вещества дополнена аналитическим обзором, в котором кратко описана технология получения веществ, возможные области их применения.

База «Фазы» (<http://phases.imet-db.ru>) содержит данные по свойствам химических систем и тройных неорганических соединений. БД содержит информацию о десятках тысяч тройных соединений (соединений, образованных тремя химическими эле-