

МИНЕРАЛОГО-КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ БАЗА ДАННЫХ «WWW-MINCRYST» И ЕЁ ИНСТРУМЕНТЫ – 20 ЛЕТ РАЗВИТИЯ

**Варламов Д.А. (dima@iem.ac.ru), Докина Т.Н., Дрожжина Н.А.,
Самохвалова О.Л.**

Московское отделение. Институт экспериментальной минералогии РАН

MINERALOGY-CRYSTALLOCHEMICAL DATABASE «WWW-MINCRYST»
ANDITSTOOLS – 20 YEARS OF EVOLUTION

Varlamov D.A., Dokina T.N., Drozhzhina N.A., Samokhvalova O.L.
Moscow branch. Institute of Experimental Mineralogy RAS, Chernogolovka, Russia

В конце 1997 г. на основе появившихся средств разработки интерактивных Интернет-ресурсов была задумана и реализована база данных WWW-MINCRYST, ставшая одним из первых интерактивных Интернет-ресурсов в области наук о Земле в России и в мире (Чичагов, 2001). Инициатором работ был зав. группы РСА ИЭМ РАН к.г.-м.н.А.В.Чичагов. Целью ресурса стало обеспечение актуальной достоверной информацией в области кристаллохимии/кристаллографии минералов и их синтетических аналогов максимально широкого круга пользователей в областях науки, оперирующих с кристаллическим веществом и предоставление интерактивного Интернет-доступа пользователям к большим массивам минералого-кристаллохимической информации. Фактологической основой WWW-MINCRYST послужили накопленные с 1985 года литературные данные по кристаллическим структурам минералов, сведенные в локальную базу данных Mincrust-PC. Далее, на основе базы данных была создана Информационно-вычислительная система (ИВС) WWW-MINCRYST с инструментами по интерактивной обработке данных и их анализу. Основы идеологии и технологии ИВС описаны здесь (Чичагов, 2007; Варламов, 2013).

Сейчас WWW-MINCRYST представляет многоуровневую двуязычную (рус/eng содержание и языки интерфейса) информационную систему, в которую входят:

(а) база данных (БД) – более 10000 (!) записей для более чем 4200 уникальных фаз, включая почти 4000 природных минералов и около 300 синтетических фаз – их структурных аналогов, отличающихся по составу (например, с заменой одного из катионов), и неорганических соединений (силикаты, фосфаты, бораты и др.), близких по свойствам к природным веществам. БД содержит данные из 140 иностранных и отечественных журналов за период от 30-х годов XX века вплоть до 2017 года. Ежегодное пополнение – не менее 350-400 записей + до 150 структур, подвергнутых ревизии и изменениям. Основа БД – «Базовая запись», которая содержит информацию о названии (в соответствии с классификацией IMA или рекомендациями IUPAC), хим. составе,

симметрии, параметрах элементарной ячейки, координатах атомных позиций с изотропными температурными факторами и заселенностями, информацию о межплоскостных расстояниях, HKL-индексах и интенсивностях сильнейших рефлексов рентгенодифракционной картины поликристалл-фазы, а также ссылки на публикации. Запись специфицирована по полезным свойствам, особенностям химического состава и структуры, а также по P - T условиям синтеза и т.п. Каждая запись содержит "монокристалльные" и "поликристалльные" характеристики кристаллической фазы. Для 2500 фаз сделаны экспресс-оценки потенциальной энергии кристаллической решетки.

(б) средства поиска по названиям (и их фрагментам) минералов и содержанию их спецификаций, химическому составу (комбинации присутствующих/отсутствующих элементов, анионные группы, устойчивые сочетания элементов), кристаллографическим параметрам, литературным источникам, вспомогательной информации. По ряду параметров поиска у ИВС пока нет аналогов;

(в) мультимедийные интерактивные формы визуализации структур и спектров. Модуль **WWW-Crystpic** формирует динамические интерактивные изображения моделей кристаллических структур в шарах-сферах и в полиэдрических проекциях (до 138 позиций и до 1500(!) атомов на структуру). Модуль позволяет проводить всевозможные манипуляции с моделью структуры, включая масштабирование, непрерывное и/или автоматическое дискретное вращение вокруг "экранных" осей X, Y, Z , ориентацию по кристаллографическим осям, hkl-фрагментацию структуры (на hkl-ориентированные фрагменты толщиной $d(hkl)$), наращивание элементарных ячеек вдоль любых выбранных направлений для формирования "сверхструктур" и мотивов, а также прямой "ручной" и автоматизированный для малых полиэдров (тетраэдров и октаэдров) расчет любых межатомных расстояний и углов в структуре. Программа изображает любые полиэдры, включая "дефектные" с необычно малыми ("плохими") межатомными расстояниями. Модуль **WWW-Mixipol** предназначен для графического представления полных расчетных спектральных профилей поликристалл-рентгенограмм с возможностями манипулирования спектрами для разных источников излучения и разных типов спектральных шкал. Также модуль способен формировать рентгенограммы *смесей* фаз (до 6 фаз) при возможности варьирования содержаниями компонентов смеси. Предусмотрены упрощенные варианты представления информации в виде традиционных шаровых структур и линейчатых спектров.

(г) классификационные схемы (Годовиков, Бокий, Chiriotti);

(д) системы динамически формируемых WWW-ссылок на внешние информационные ресурсы (Mindat, Webmineral и др., поисковые системы);

(е) WWW-ориентированный инструментарий разработчика (импорт входных данных, проверка, редакция), возможность работы с пользовательскими данными.

Наличие большого количества структур и средств визуализации позволяет ИВС проводить весьма нестандартные статистические выборки по структурным

данным, а также изучать принципиально новые подходы к представлению кристаллических структур через формирование *различных* вариантов структурных моделей. Показано, что в ряде случаев кристаллическое пространство можно организовать, *нестрого* привязываясь к традиционному катионно-анионному изображению, формируя в смешанном шаровом и полиэдрическом изображении структуру на основе любых атомов, входящих в их состав. Метод эффективен для сложных "неправильных" бескислородных структур (фосфиды, сложные сульфиды и сульфосоли и т.п.).

Востребованность ИВС подтверждается статистикой – до 170 Гб скачиваемой информации, до 7,5 млн. единичных запросов, до 45000 уникальных клиентов в год.

Работы по ИВС WWW-MINCRYST были поддержаны 6 грантами РФФИ (сейчас – грант РФФИ 15-07-08399-а, рук. Варламов Д.А.).

Чичагов А.В., Варламов Д.А., Диланян Р.А. и др. МИНКРИСТ - кристаллографическая база данных для минералов: локальный и сетевой (WWW) варианты // Кристаллография, 2001, т. 46, № 5, с. 950-954

Чичагов А.В., Варламов Д.А., Ершов Е.В. и др. Кристаллографическая и кристаллохимическая база данных для минералов и их структурных аналогов (WWW-МИНКРИСТ) // Записки РМО, 2007, т.136, № 3, с.135-141

Варламов Д.А., Докина Т.Н., Дрожжина Н.А., Самохвалова О.Л. WWW-MINCRYST: Интернет-ориентированная информационно-вычислительная система по кристаллографии и кристаллохимии минералов // Вестник ЮУрГУ, серия «Вычислительная математика и информатика», 2013, т.2, вып.1, с.26-32