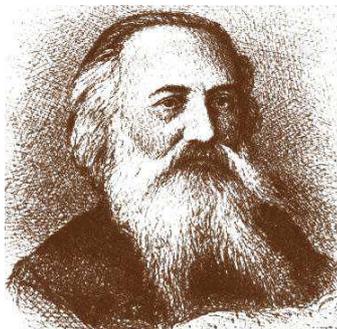


Российское минералогическое общество
Национальный минерально-сырьевой университет «Горный»
Российская академия наук, Отделение наук о Земле



Годичное собрание РМО
Минералогия во всем пространстве сего слова
Федоровская сессия – 2014
7-9 октября 2014 года

Программа



САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
2014

Светова Е.Н., Скамницкая Л.С. (Петрозаводск).

Редкометалльная минерализация палеопротерозойских кварцевых конгломератов Гирвасской площади (Центральная Карелия)

Судариков С.М. (Санкт-Петербург).

Самородные металлы в гидротермальных осадках и придонных водах Восточно-Тихоокеанского поднятия

Сушкин Л.Б. (Хабаровск).

Редкие и редкоземельные элементы в рудных формациях Сихотэ - Алинской провинции

Фирстова А.В., Черкашев Г.А., Степанова Т.В., Бабаева С.Ф. (Санкт-Петербург).

Редкие и благородные элементы в сульфидных рудах в сульфидных рудах гидротермального узла "Семенов" Срединно Атлантического хребта (САХ)

Секция Ф1. Минералогическая кристаллография и кристаллохимия

Авдонцева М.С., Кривовичев С.В., Яковенчук В.Н. (Санкт-Петербург).

Уточнение кристаллической структуры нефедовита

Аксенов С.М., Расцветаева Р.К., Мирошкина А.Е., Коноваленко С.И., Ананьев С.А., Чуканов Н.В. (Москва).

Микродвойникование и особенности кристаллической структуры щелочного литиевого амфибола необычного состава

Аль-Шурай А.А., Гуржий В.В., Кривовичев С.В. (Санкт-Петербург).

Синтез и кристаллическая структура нового селената уранила

Антонова Е.И., Анпилогова А.С., Лобзова Р.В., Каримова О.В., Магазина Л.О. (Москва).

Солевые выцветы на природных и искусственных материалах кладки Георгиевского и Троицкого соборов (г. Юрьев-Польской)

Варламов Д.А., Докина Т.Н., Дрожжина Н.А., Самохвалова О.Л. (Черноголовка).

Информационно-вычислительная система «WWW-MINCRYST» по кристаллохимии минералов и их аналогов как интернет-инструментарий минералогов и кристаллографов

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА «WWW-MINCRYST» ПО КРИСТАЛЛОХИМИИ МИНЕРАЛОВ И ИХ АНАЛОГОВ
КАК ИНТЕРНЕТ-ИНСТРУМЕНТАРИЙ МИНЕРАЛОГОВ И
КРИСТАЛЛОГРАФОВ

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

Московское отделение. Институт экспериментальной минералогии РАН

INFORMATION-CALCULATION SYSTEM «WWW-MINCRYST» ON A
CRYSTALLOCHEMISTRY OF MINERALS AND THEIR ANALOGUES AS
INTERNET-TOOL FOR MINERALOGISTS AND CRYSTALLOGRAPHERS

**Varlamov D.A. (dima@iem.ac.ru), Dokina T.N., Drozhzhina N.A.,
Samokhvalova O.L.**

Moscow branch. Institute of Experimental Mineralogy RAS

База данных WWW-MINCRYST и информационно-вычислительная система (ИВС) на ее основе (<http://mincryst.iem.ac.ru>), созданные в декабре 1997 г., стали одними из первых научных интерактивных Интернет-ресурсов в области наук о Земле в России и в мире (Чичагов, 2001). Цель ресурса – обеспечить достоверной актуальной информацией в области кристаллохимии/кристаллографии минералов и их синтетических аналогов максимально широкий круг пользователей в областях науки, оперирующих с кристаллическим веществом. ИВС была призвана обеспечить интерактивный Интернет-доступ пользователям к накопленным с 1985 года литературным данным по кристаллическим структурам минералов, затем в ИВС были введены разработки по интерактивной обработке данных и их анализу. Инициатором работ стал зав. группы РСА ИЭМ РАН к.г.-м.н. А.В. Чичагов. Основы идеологии и технологии ИВС описаны здесь (Чичагов, 2007; Варламов, 2013).

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

(а) база данных (БД) – около 8750 записей для более чем 3700 уникальных фаз, включая 3400 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 более чем 140 иностранных и отечественных журналов за период от 30-х годов XX века вплоть до 2014 года. Ежегодное пополнение – не менее 300 записей. Базовая запись содержит информацию о названии (в соответствии с классификацией IMA или рекомендациями IUPAC), химическом 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 по расшифровке или уточнению кристаллической структуры. 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 2400 фаз сделаны экспресс-оценки потенциальной энергии кристаллической решетки.

(б) средства поиска по названиям (и их фрагментам) минералов и их спецификаций, химическому составу (комбинации присутствующих/отсутствующих элементов), кристаллографическим параметрам, литературным источникам, вспомогательной информации. По ряду параметров поиска у ИВС 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 инструментальный 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 развивать принципиально новые подходы к представлению кристаллических структур – благодаря формированию различных вариантов структурных моделей. Показано, что в ряде случаев кристаллическое пространство можно организовать, не строго 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 (фосфида, сложные сульфиды и сульфосоли и т.п.).

Востребованность ИВС подтверждается статистикой – до 50-60 Гб скачиваемой информации в год, 4,1 млн. единичных запросов, до 35000 уникальных клиентов.

Работы по ИВС WWW-MINCRYST были поддержаны 5 грантами РФФИ (сейчас – грант РФФИ 12-07-00742-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, том 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-MINCRYST) // 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