

**XIV РОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
(С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ)  
ПО ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ ВЕЩЕСТВ  
(РКТС- 14)**

**МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ  
в 2-х томах**

**ТОМ 1**

---

**Пленарные и устные доклады**

---

**15 – 17 октября 2014 года**

**ФГБОУ ВПО «Казанский национальный исследовательский  
технологический университет»**

**г. Казань**

7. Н.А. Измайлов. *Электрохимия растворов*. Химия, М., 1976.  
8. С.А. Kraus. *J. Phys. Chem.* **60** (1956) 129.

---

## БАЗА ДАННЫХ «ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ»

Киселева Н.Н., Дударев В.А.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук, Россия, 119991 Москва, Ленинский пр-т, д. 49, e-mail: [kis@imet.ac.ru](mailto:kis@imet.ac.ru)*

Разработана база данных (БД) *IRIC - Information Resources of Inorganic Chemistry*, содержащая информацию о компьютерных информационных ресурсах в области неорганической химии и материаловедения, которая доступна пользователям из 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 [1]. Рассмотрена структура БД и ее пользовательский интерфейс. В настоящее время БД содержит сведения о более 120 информационных системах. БД *IRIC* предназначена для навигации специалистов в море информационных ресурсов в вышеуказанных предметных областях, а также для статистического анализа и выявления основных тенденций развития предметной области. БД *IRIC* имеет две версии – русскоязычную и англоязычную.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Н.Н. Киселева, В.А. Дударев. *Информационные технологии*. **12** (2010) 63.

---

## ИНТЕГРИРОВАННАЯ СИСТЕМА БАЗ ДАННЫХ ПО СВОЙСТВАМ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ И ЕЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО КОНСТРУИРОВАНИЯ НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Киселева Н.Н., Дударев В.А., Столяренко А.В.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова» Российской академии наук, Россия, 119991 Москва, Ленинский пр-т, д. 49, e-mail: [kis@imet.ac.ru](mailto:kis@imet.ac.ru)*

Интегрированная система (ИС) баз данных (БД) по свойствам неорганических веществ и материалов объединяет БД, разработанные в ИМЕТ РАН [1]: по фазовым диаграммам полупроводниковых систем ("Диаграмма"), по свойствам акустооптических, электрооптических и нелинейнооптических веществ ("Кристалл"), по ширине запрещенной зоны неорганических веществ («Bandgap»), БД по свойствам неорганических соединений («Фазы») и БД по свойствам химических элементов («Elements»), а также БД "AtomWork" по свойствам неорганических веществ, разработанную в NIMS (National Institute for Materials Science Technology – Национальный институт материаловедения, Япония). Для интеграции БД используется SOA (сервисно-ориентированная архитектура), базирующаяся на применении Web-сервисов для обеспечения взаимодействия между

гетерогенными информационными системами. Для поиска релевантной информации в контексте информационных систем используется специально разработанная метабаза, описывающая содержимое интегрируемых БД в терминах формализованной иерархии понятий, присущих неорганической химии и материаловедению. ИС доступна для зарегистрированных пользователей по адресу: <http://www.imet-db.ru>.

Разработанная интегрированная система БД предназначена для информационного обслуживания специалистов и для компьютерного конструирования неорганических соединений, для чего была разработана специальная информационно-аналитическая система (ИАС) [2]. Последняя, помимо интегрированной системы БД и подсистемы анализа информации и прогнозирования, объединяющей комплекс программ распознавания образов по прецедентам, включает базу найденных закономерностей (база знаний) и базу полученных прогнозов возможности образования и свойств еще не полученных неорганических соединений.

Информационно-аналитическая система позволяет решить две важные задачи. Во-первых, она частично автоматизирует анализ огромной экспериментальной информации, накопленной химией, что позволяет найти закономерности в данных, которые применяются для конструирования новых соединений с заданными свойствами, причем на этапе прогнозирования еще не полученных фаз используются только значения параметров компонентов. 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 соединений и оценку их свойств. Существенным преимуществом разработанной ИАС является то, что она имеет доступ из сети Интернет (<http://ias.imet-db.ru>). С помощью ИАС удалось получить прогноз еще не полученных неорганических соединений и оценить некоторые их свойства. Экспериментальная проверка показала, что средняя точность полученных прогнозов превышает 80 % [3].

## ЛИТЕРАТУРА

1. Н.Н. Киселева, В.А. Дударев, В.С. Земсков. *Успехи химии*. 79 (2010) 162.
2. N.N. Kiselyova, A.V. Stolyarenko, V.V. Ryazanov, O.V. Senko, A.A. Dokukin, V.V. Podbel'skii. *Pattern Recognition and Image Analysis*. 21 (2011) 88.
3. Н.Н. Киселева *Компьютерное конструирование неорганических соединений. Использование баз данных и методов искусственного интеллекта*. Наука, Москва, 2005.

---

## РАСЧЕТ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БИНАРНЫХ РАСПЛАВОВ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ

Крашанинин В.А.

*Институт металлургии УрО РАН,  
Россия, 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101.  
E-mail: [krash\\_55@mail.ru](mailto:krash_55@mail.ru)*

Изучение металлических систем всегда привлекало исследователей, как с теоретической, так и с чисто практической точки зрения. При этом следует подчеркнуть особую важность изучения многокомпонентных систем, которые чаще используются в технике, нежели чистые вещества. Поэтому одной из важнейших задач физики конденсированного состояния является прогнозирование свойств материалов. Прогнозирование термодинамических свойств