

БИБЛИОГРАФИЧЕСКАЯ ИНФОРМАЦИЯ В ОБЪЕДИНЕННОЙ БАЗЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Сергеева Э.И., Девина О.А. (ГЕОХИ РАН),
Медведкина О.Н. (Ун-т "Дубна"), Ходаковский И.Л. (Ун-т "Дубна", ГЕОХИ РАН)
igor-kho@yandex.ru; тел.: (496)-212-28-03; (499)-137-57-42

Ключевые слова: *библиографическая информация, база термодинамических данных*

В качестве основной структурной единицы объединенной базы термодинамических данных (Joint-TDB), создаваемой в Интернете коллективом авторов (Ходаковский, Осадчий и др., 2008) [1], выбрана химическая система. По количеству химических элементов все системы разделены на одно-, двух-, трех-, ... n-компонентные. Их последовательность и обозначение в каталоге определяется принятой последовательностью расположения химических элементов. К концу 2008 года в Joint-TDB содержалась информация для 3700 химических систем.

Для хранения и обработки экспериментальной термодинамической информации база данных структурирована таким образом, что для каждой химической системы создается одинаковый набор файлов. Один из этих файлов – файл «biblio.doc», содержащий, по возможности, полную библиографическую информацию. Отсутствие ограничений на объем информации в памяти компьютера позволяет заменить программную генерацию библиографической ссылки простым копированием в случаях ее повторения. Так как химические системы по фазовому состоянию могут быть гомогенными и гетерогенными, то для гомогенных подсистем термодинамическая информация сгруппирована в поддиректориях, в названиях которых вводятся дополнительные обозначения, взятые в скобки (они по умолчанию отсутствуют для гетерогенных систем):

- aq** – ионы и нейтральные частицы в водном растворе в стандартном состоянии (бесконечное разведение);
- aq_sol** – термодинамические данные для водных растворов конечных концентраций;
- gas** – термодинамические характеристики для газовой фазы;
- solid_sol** – термодинамические характеристики для твердых растворов;
- kinetik_data** – данные по кинетике химических реакций.

Например, термодинамические данные для гидролиза ионов палладия приводятся в поддиректории «O_H_Pd/aq». Для каждой из указанных выше подсистем в данной химической системе создаются отдельные файлы библиографической информации. Термодинамическая информация для каждой химической системы (или подсистемы) сгруппирована в файлах:

- refersub** – рекомендованные в фундаментальных справочных изданиях термодинамические величины для веществ;
- rearefer** – рекомендованные значения термодинамических характеристик для химических реакций;
- litersub** – согласование литературных данных для веществ;
- realiter** – согласование литературных данных для химических реакций.

Термодинамическая информация в этих файлах приводится в хронологическом порядке. В основу правил записи библиографических ссылок положен исправленный и дополненный вариант, принятый Рабочей Группой Национального Комитета КОДАТА в 1987 г.:

- При форматировании библиографических ссылок используются: выравнивание по ширине, выступ 3 см. и интервалы (перед ссылкой – 6 pt, после – 0 pt, междустрочный - одинарный).
- Каждая библиографическая ссылка должна содержать авторский код и, по возможности, полную ссылку.

Оформление ссылки начинается с того, что указываются фамилии всех авторов на английском или русском языках в том же порядке, что и в работе. Для каждого автора фамилия сопровождается инициалами, стоящими после фамилии. Далее записывается полностью, без сокращений, на английском или русском языках, название работы, заканчивающееся точкой и знаком две косые черты. Затем следует название издания, том, серия, № выпуска, страницы, год (в

скобках). Краткая ссылка (авторский код) представляет собой сокращенное обозначение полной ссылки, используемое в текстах и таблицах.

Код ссылки включает:

- Год выхода работы - для 20-го и 21-го столетий используются две последние цифры года, а для 19-го века год указывается полностью; для работ на русском языке год указывается в конце кода ссылки.
- Первые три буквы фамилии автора или 2-х первых авторов, разделенные наклонной чертой; используются только заглавные буквы для 20-го века, а для 21-го века первые буквы фамилий авторов – заглавные, вторая и третья буквы – строчные.
- В случае совпадения кодов, сформированных по указанным выше правилам, вводится дополнительное цифровое обозначение, например, ИВА/СИД78, ИВА/СИД78_2.

В конце ссылки приводится источник библиографической информации: PDF-, DOC-файлы, оттиск, ксерокс и т.д., а также (при необходимости) название директории (поддиректории), в которой хранится соответствующий файл. Компьютерная база библиографической информации содержит PDF - и DOC - файлы статей по неорганической и физической химии из различных научных журналов и библиографические ссылки на них. Пополнение базы проводится путем постоянного мониторинга научных журналов, содержащих термодинамическую информацию. Этот поиск осуществляется в Интернете на сайтах ведущих издательств мира (Elsevier Ltd., Springer Berlin, Blackwell-Synergy и др.), а также международных и национальных научных обществ. Существенная часть PDF - файлов получена от авторов статей. Кроме того, нам были переданы имеющиеся в других организациях коллекции PDF - файлов статей с условием использования их не в коммерческих, а исключительно в образовательных и научных целях (в соответствии с правилами авторского права издательств на эту продукцию). Результаты мониторинга части зарубежных научных журналов представлены в табл. 1.

Таблица 1

Результаты мониторинга научных журналов

№	Название журнала	Годы	Кол-во PDF -файлов
1.	Chem. Reviews	1949 – 2008	123
2.	Inorg. Chem.	1962 – 2008	456
3.	J. Amer. Ceram. Soc.	1985 – 2008	14
4.	J. Amer. Chem. Soc.	1920 – 1965	1753
5.	J. Chem. Thermodyn.	1969 – 2008	15
6.	J. Chem. Eng. Data	1959 – 2008	675
7.	J. Phys. Chem	1920 – 1995	1162
8.	J. Phys. Chem. Ref. Data	1972 – 2008	80
9.	J. Solid State Chem.	2006 – 2007	3
10.	J. Solution Chemistry	1972 – 2008	512
11.	Thermochimica Acta	1999 – 2008	5
12.	Amer. Mineralogist	1997 – 2008	263
13.	Chemical Geology	1995 – 1999	14
14.	Contrib. Mineral. Petrol.	1977 – 2008	24
15.	Geochim. Cosmochim. Acta	1995 – 2008	50
16.	Phys. Chem. Minerals	1977 – 2008	102
1-16.	Всего		5191

Всего в Joint-TDB к концу 2008 года содержались PDF - файлы 5300 журнальных статей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 07-05-01108)

Литература

1. *Ходаковский И.Л., Осадчий Е.Г. и др.* Согласование и формы представления экспериментальной термодинамической информации в объединенной базе данных // Электрон. науч.-информ. журнал «Вестник Отделения наук о Земле РАН», № 1(26) 2008, М.:ИФЗ РАН, 2008.

URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2008/informbul-1_2008/mineral-37.pdf

Вестник Отделения наук о Земле РАН - №1(27) 2009

Информационный бюллетень Ежегодного семинара по экспериментальной минералогии, петрологии и геохимии 2009 года (ЕСЭМПГ-2009)

URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2009/informbul-1_2009/mineral-19.pdf

Опубликовано 1 сентября 2009 г.

© *Вестник Отделения наук о Земле РАН, 1997 (год основания), 2009*

При полном или частичном использовании материалов публикаций журнала, ссылка на «Вестник Отделения наук о Земле РАН» обязательна