

Общероссийский математический портал

А. О. Еркимбаев, В. Ю. Зицерман, Г. А. Кобзев, Систематизация данных по физико-химическим свойствам и применению углеродных наноструктур,
ТВТ, 2010, том 48, выпуск 6, 869–876

<https://www.mathnet.ru/tvt876>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<https://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.87

28 апреля 2025 г., 19:41:28



УДК 541.11

СИСТЕМАТИЗАЦИЯ ДАННЫХ ПО ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ И ПРИМЕНЕНИЮ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР

© 2010 г. А. О. Еркимбаев, В. Ю. Зицерман, Г. А. Кобзев

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва

Поступила в редакцию 11.05.2010 г.

Разработаны методические основы создания информационных систем по свойствам наноразмерных объектов. Показано, что основным требованием к таким системам является способность поддерживать вариации логической структуры данных, проявляемые в перманентной смене номенклатуры характеристик и правил идентификации, зависящих от конкретного вида наноструктуры. Предложена компьютерная технология организации фонда справочных данных, учитывающая специфику наноструктур и наноматериалов. При конкретной реализации базы данных в качестве сферы приложения выбран наноуглерод с учетом множества его изученных форм (фуллерены, нанотрубки, наноалмазы и т.д.), в сочетании с непрерывным потоком данных о вновь открытых формах, выявлением их свойств и потенциала применения. Схема описания данных основана на многофакторной классификации наноформ углерода, использующей топологические признаки, тип химической связи и многочисленные морфологические признаки. Текущее содержание базы данных представлено термодинамическими свойствами фуллеренов, их конденсированных аналогов и частиц наноалмаза. Показано, что инструментарий базы данных позволяет в концентрированном виде хранить и распространять численные и качественные данные для множества форм наноуглерода различной структуры и типологии.

ВВЕДЕНИЕ

После открытия фуллерена и углеродных нанотрубок (УНТ) синтезировано множество форм наноуглерода, различающихся по размеру, морфологии, энергетической стабильности и т.д. [1, 2]. В значительной степени интерес к наноформам углерода определяется их уникальными свойствами (особенно УНТ, графена, наноалмазов), благодаря которым открываются перспективы для создания новых устройств. Так, УНТ характеризуются рекордным значением модуля Юнга (на уровне ТПа), а графены – рекордным значением теплопроводности (свыше 5000 Вт/мК). Наряду с “популярными” наноструктурами (УНТ, фуллерены) объектом интенсивных исследований стали объемные формы наноуглерода, прежде всего графит, свойства и направленное изменение которого связаны с топологией сетки sp^2 -орбиталей [3]. На его основе созданы различные классы наноматериалов: волокна, стеклоподобный углерод, композиты и др. Множество макроскопических веществ синтезировано на базе фуллеренов и частичек алмаза, выступающих в роли наноструктурных единиц [1, 2].

Огромное число изученных форм в сочетании с потоком данных о вновь синтезированных определяют актуальность создания в этой области справочно-аналитических материалов и компьютерных баз данных (БД). В то же время специфика предмета и ограниченный уровень знаний достаточно сильно сказываются на объеме и качестве

данных, что проявляется в разбросе результатов измерений и частой смене номенклатуры понятий и характеристик. Поэтому созданию БД должна предшествовать большая методическая работа, с тем чтобы сформулировать принципы обработки и систематизации информационного потока.

В статье описаны предварительные итоги методической работы, которые позволили: 1) выработать принципы систематизации форм наноуглерода; 2) сформировать гибкую структуру данных с учетом возможных вариаций номенклатуры характеристик. Анализ специфики информационного потока и данных по свойствам позволил разработать общую схему описания данных (метаданные [4]), реализованную посредством инструментария БД PostgreSQL [5, 6], рассматриваемой как альтернатива коммерческим продуктам при хранении естественно-научных данных. На ее основе создана и размещена в сети WEB-ориентированная БД DATA_N [7]. Содержимое БД включает пока ограниченный объем сведений по термодинамическим свойствам фуллеренов, их конденсированных фаз (фуллеритов) и нескольких видов частиц, образующихся при детонационном синтезе наноалмаза [2]. Основной целью была отработка принципов и технологии, включая возможности: 1) описания произвольных наноформ углерода; 2) хранения и распространения данных разной структуры и формата – численных, текстовых, графических, программных кодов и т.п.

ЛОГИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ДАННЫХ ПО СВОЙСТВАМ НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

В работах [4, 8, 9] показано, что для обширного множества соединений информацию по свойствам невозможно встроить в “жесткую” структуру данных: возникает необходимость варьировать идентификацию и номенклатуру характеристик в зависимости от разновидности объектов. Реализация этого требования легла в основу предложенной концепции и технологии построения теплофизических БД широкого профиля [8, 9]. Под этим термином понимается система, способная решать задачи хранения, обработки и распространения данных: для веществ и материалов произвольного состава и структуры, равно как и для атомно-молекулярных единиц (молекулы, кластеры, структуры типа УНТ и проч.); для представления свойств и характеристик при различном формате данных; для адекватного учета совокупности факторов, определяющих свойства (структура и конфигурация образца, технология изготовления, факторы влияния и т.п.). Отличительная черта БД широкого профиля — способность к настройке на произвольную предметную область с характерной для нее спецификой объектов, свойства которых должны быть представлены с достаточной полнотой и достоверностью. Их использование имеет целью преодолеть ограничения, присущие традиционным БД, среди которых ориентация на определенный класс веществ, однозначность их идентификации (по формуле или наименованию), фиксированный перечень свойств и логическая структура записи.

Для проектирования БД широкого профиля используется технология полуструктурированных данных (ПСД), определяемых как данные, логическая структура которых подвержена вариациям при переходе между разными записями [4, 10, 11]. Вариации проявляются в изменении номенклатуры идентификаторов и характеристик, а также типа и формата данных. Возможными причинами вариации структуры данных являются различия физических свойств веществ и классов, изменения в номенклатуре данных при смене физической модели, зависимость описания от диапазона параметров, различия в способах представления данных, расширение требований к идентификации соединения.

Переход к ПСД позволяет естественным путем учесть совокупность факторов, определяющих наряду с параметрами состояния свойства объекта (структуру и конфигурацию образца, технологию изготовления, факторы влияния, метастабильность и т.п.); особенности свойств новых веществ и материалов; различия в свойствах объектов, проявляемые на макро- (вещество), микро- (атомы, молекулы, радикалы) и мезоуровнях (кластеры, на-

ноструктуры и т.п.). При разработке БД главная особенность структуры и схемы описания состоит в том, что она не может быть предугадана, т.е. априорная схема всегда заменяется апостериорной.

СИСТЕМАТИЗАЦИЯ ДАННЫХ ДЛЯ НАНОУГЛЕРОДА

Классификация и идентификация объектов. Наиболее существенна грань, отделяющая собственно наноструктуры (кластеры, нанотрубки и т.п.) от наноматериалов, т.е. объектов макроскопической природы, чья структурная единица имеет размер менее 100 нм. Авторы [12] поэтому разделили нанообъекты на изолированные нанокластеры и нанокластерные системы, а множество кластеров — на шесть классов, ориентируясь только на метод синтеза: молекулярные, лигандные кластеры и т.п. Более детальная классификация основывается на топологических признаках, когда за основу принимается число измерений K , протяженность вдоль которых достигает макроскопического масштаба [13]. Этот индекс может принимать четыре значения ($K = 0, 1, 2, 3$). Значение $K = 0$ соответствует кластеру, а $K = 3$ — макроскопическому объекту, для которого приставка “нано” относится лишь к структурному элементу. Промежуточные значения $K = 1, 2$ соответствуют одномерным и двумерным структурам, у которых макроскопический масштаб охватывает одно или два измерения (нанопроволока, пленка).

Также аттестуют элементы, формирующие наноструктуру, но соответствующий индекс здесь $L = 0, 1, 2$; исключается значение $L = 3$, относящееся к макроскопическим объектам. Класс объектов, сформированных из элементов одного типа, определяет “наноформула” вида KDL , а из элементов нескольких типов — $KD\{L, M, N\}$, при том что выполняется неравенство $K \geq \max\{L, M, N, \dots\}$. Например, кластеры A_n , образованные из химической формы A , попадают в класс $0D0$, поскольку размерность $K = 0$ относится и к самому кластеру, и к структурному элементу A . Образованные из этого элемента нанопроволока или пленка относятся к классам, определяемым формулами $1D0, 2D0$.

Наноформы углерода можно классифицировать также по гибридизации химической связи. Такая схема учитывает способность углерода принимать, наряду с основными (sp^3 — алмаз, sp^2 — графит и sp — карбин), смешанные типы гибридизации [14]. В этом случае структура задается либо наложением двух типов гибридизации (скажем, $sp^3 + sp^2$ для наноалмаза с примесью графита или аморфного углерода), либо заданием промежуточного типа гибридизации типа sp^n , где n — нецелый индекс в интервалах 1–2 или 2–3 (например,

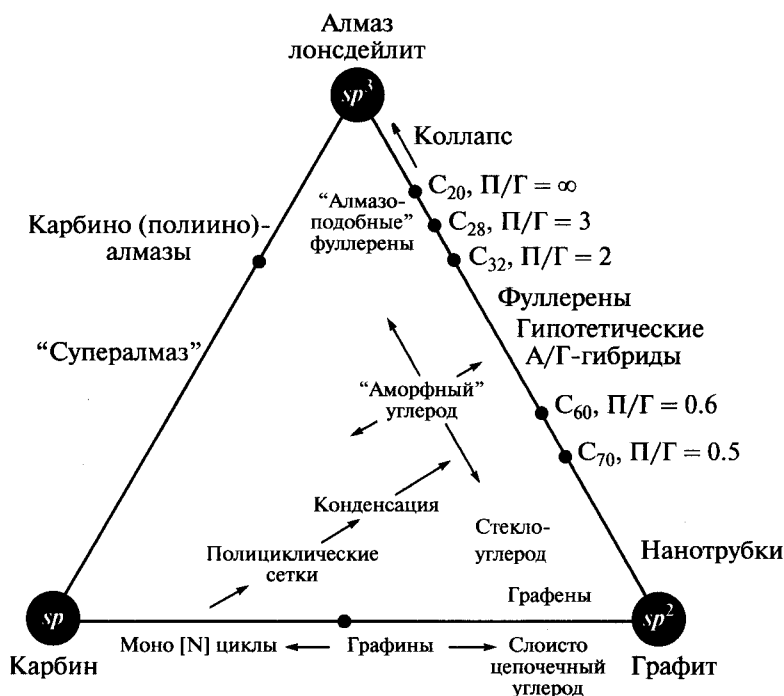


Рис. 1. Классификационная диаграмма аллотропных форм углерода [14].

для фуллера C_{60} индекс $n = 2.27$). Классификационную схему хорошо представляет треугольная диаграмма (рис. 1), вершины которой отвечают целочисленной степени гибридизации. Вдоль линии sp^2 – sp^3 располагаются формы с индексом $n \in [2,3]$, например фуллерены и УНТ, вдоль линии sp^1 – sp^2 – наноформы с $n \in [1,2]$, к которым относятся моноциклы, являющиеся обычно зародышами при образовании УНТ, или слоисто-цепочечный углерод, построенный из высоконапряженных графитовых слоев. Заполнена в схеме [14] и третья линия (sp^1 – sp^3), на которой располагают гипотетические формы с включением в решетку алмаза фрагментов в виде цепочек атомов углерода с sp -гибридизацией [2]. Внутренняя часть тройной диаграммы заполнена смешанными формами углерода (аморфный, алмазоподобный, стеклообразный и др.) со случайным расположением атомов различной гибридизации. При тотальном охвате синтезированных и гипотетических форм достаточно указать только один индекс (табл. 1).

В то же время для столь многообразного семейства, как наноуглерод, классификация по одному-двум физическим признакам невозможна. Например, гибридизации sp^3 , помимо алмаза, отвечают еще два аллотропа: лонсдейлит и кубан, которые при той же топологии и гибридизации радикально отличаются по кристаллической структуре. Естественно, это многообразие нарастает при переходе на наноуровень. Скажем, для различения

типов наноалмаза указывается его происхождение (минеральное, детонационный синтез, метеоритное), морфологические признаки (сферическая или фуллереноподобная форма, полиэдрический тип, наноалмазная пленка и др.), размер, измеряемый в числе атомов или в нм и т.п. [2, 15]. В качестве идентификатора необходима и формула элементарного звена, поскольку алмазные структуры могут формироваться не только из атомов, но и из молекул того же фуллера. Как следствие, классификация, а точнее идентификация, наноформ должна удовлетворять двум требованиям: 1) включать достаточно большой набор признаков для выделения каждой из форм; 2) допускать перестройку набора признаков в зависимости от класса объектов.

Кроме основных признаков (название, топологический индекс, гибридизация), в данной работе предусмотрено еще два блока. Блок под названием "уровень" разделяет объекты различной природы. На макроуровне рассматриваются объекты с числом частиц порядка 10^{23} , на микро-

Таблица 1. Нумерованный список типов гибридизации

1	sp^1	6	$sp^n, 1 < n < 3$
2	sp^2	7	$sp^1 + sp^2$
3	sp^3	8	$sp^1 + sp^3$
4	$sp^n, 2 < n < 3$	9	$sp^2 + sp^3$
5	$sp^n, 1 < n < 2$	10	$sp^1 + sp^2 + sp^3$

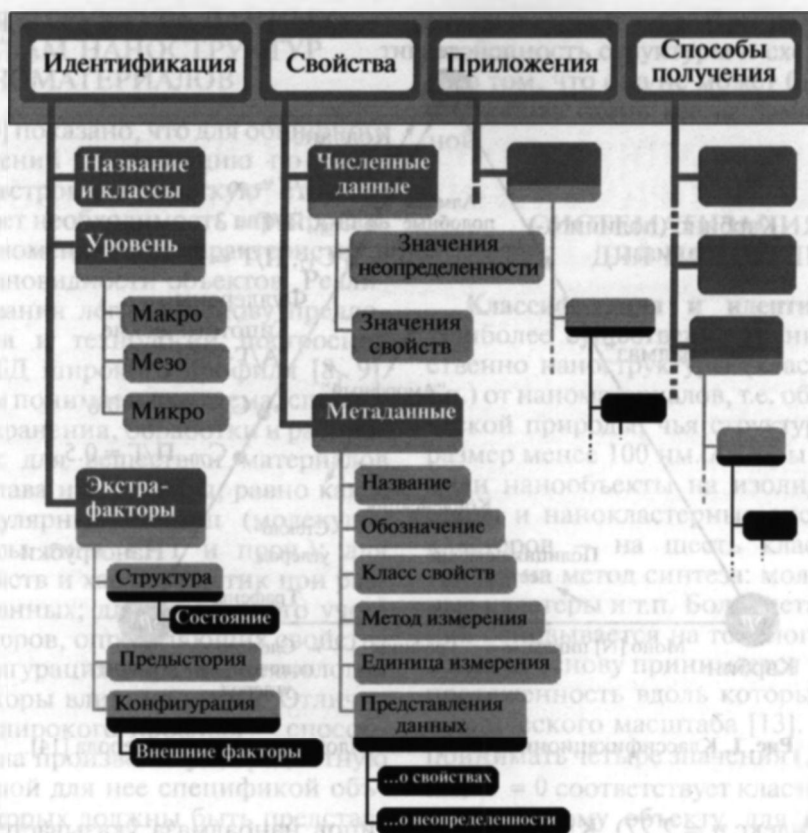


Рис. 2. Типовая схема организации данных.

уровне – одиночные частицы (атомы, молекулы C_n с небольшим числом атомов $n = 2 - 10$), на мезоуровне – объекты промежуточного масштаба и природы (кластеры, наноструктуры, пленки и т.п.). Естественно, что набор идентификаторов для наноматериалов (макроуровень) заметно отличается, включая, например, данные по фазе, от набора для объектов микро- или мезоуровня. Второй блок, “экстра-факторы”, конкретизирует морфологию, состояние объекта, предысторию образца (происхождение, метод изготовления), внешние факторы (поля, химическое или термическое воздействие и проч.).

Типовая структура данных. С использованием ПСД разработана концептуальная модель для наноструктур с возможностью адаптации к определенному виду объектов. Модель обладает “устойчивым каркасом” и способна к настройке на предметную область с характерной для нее номенклатурой идентифицирующих признаков и свойств. Типовая структура, обладая достаточной общностью, включает блоки: “идентификация”, “свойства”, “приложения”, “способы получения” (рис. 2). Совокупность характеристик, определяющих специфику объектов, распределена по двум блокам: “идентификация” и “свойства”. Блок “идентификация” обеспечивает выделение

формы по топологии, гибридизации, химическим формулам (брутто и элементарного звена) и целой совокупности детализирующих указателей (“экстра-факторы”).

Блок данных “свойство”. Для любого свойства предложена схема, также допускающая подстройку к специфике объекта и форме представления данных. Информация о свойстве распределена по двум блокам: “численные данные” и “метаданные” (данные о данных). Под метаданными понимаются свойства данных, определяющие их структуру, допустимые значения и способы представления, а также обеспечивающие однозначную интерпретацию и возможность автоматизированного анализа [4]. Применительно к свойствам вещества метаданные, помимо тривиальных функций (определение названия, обозначения, единицы измерения), конкретизируют метод измерения (или оценки), точное определение физической величины и, что особенно важно, форму представления неопределенности. Последний элемент на рис. 2 конкретизирует представление данных как для самого свойства, так и для его неопределенности, что необходимо при выборе начал отсчета и стандартных состояний, температурных шкал, масштабов отнесения при записи приведенных величин (параметров потенциала, критических посто-

янных и т.п.). Варианты представления данных для конкретной предметной области и соответствующие им реперные величины указаны в блоке “представление данных о свойствах”. Метаданные, детализирующие способ оценки неопределенности, сведены в блок “представление данных о неопределенности”. Неопределенность может быть приписана результату измерений и параметрам состояния, задана для каждой точки или одна на весь набор данных, в абсолютной или относительной формах. Различают также среднеквадратичную ошибку, ошибки при различных уровнях значимости результата, количественные и качественные характеристики прибора и метода [16].

Блок “численные данные” предназначен для хранения данных о свойствах и их неопределенности в виде таблиц или уравнений. Элемент “значения неопределенности” зависит от информации, заложенной в метаданных (константа или таблица в зависимости от того, задана ли погрешность на весь набор или в каждой опытной точке).

Ключевая особенность наноструктур — сильная зависимость свойств от технологии изготовления, что позволило автору [12] рассматривать метод синтеза как ведущий признак в определении типа кластера. Как следствие, для публикуемых данных характерно смешение сведений о свойствах и способах получения с детализацией кинетических факторов, режимных характеристик и т.п. Например, данные по свойствам детонационных наноалмазов существенно зависят от мощности и состава ВВ, режима детонации, условий охлаждения продуктов взрыва и т.п. [17]. С другой стороны, неопределенность (нечеткость) данных прямо сказывается на реализации потенциальных наноустройств, определяя воспроизводимость и разброс характеристик, их надежность, требования к технологии, стоимость и возможность организации масштабного производства. Это обстоятельство, равно как и общий интерес к возможно использованию углерода при создании наноматериалов и наноустройств, явилось основанием для представления информации о свойствах, приложениях и получении нанокремния в рамках единой БД. В блоках, показанных на рис. 2, сведения о приложениях и способах получения могут быть представлены как в виде обычных наборов текстовой и графической информации, так и в формализованном виде, используемом в классификаторах. Это позволяет эксперту применительно к конкретному объекту лишь указать номер (или идентификатор) соответствующего раздела. При этом создаваемый классификатор должен носить открытый характер, допуская расширение перечней и их подстройку к определенным классам объектов.

РЕАЛИЗАЦИЯ КОМПЬЮТЕРНОЙ БД

Общие сведения. Предложенная технология работы использует свободно распространяемую объектно-реляционную БД с открытым кодом PostgreSQL [5, 6], которая сочетает традиционные модели с хранением данных “размытой” структуры. Относительная устойчивость “каркаса” данных, описанная выше, служит дополнительным аргументом в пользу технологии, наследующей особенности традиционных и расширяющей их возможности за счет использования специальных инструментов. Современная БД PostgreSQL ведет происхождение из проекта POSTGRES, который разрабатывался под руководством Майкла Стоунбрейкера, профессора Калифорнийского университета в Беркли и нашел широкое применение в научном сообществе: терабайтное хранилище астрономических данных, проект ALADDIN (A Labelled Atomic Data Interface), поддержка федеральных порталов Минобрнауки РФ. Проект имел целью преодолеть ограниченность реляционной модели, обеспечивая создание и управление сложными объектами. Отличительная особенность PostgreSQL — богатство типов данных: символьных, числовых (произвольной точности), “больших объектов”, композитных типов (объединяющих элементарные типы) и ряд других. Ее функциональные возможности позволяют эксперту по свойствам веществ, не владея инструментарием БД, создавать специализированные типы данных. С практической точки зрения, построение систем на основе PostgreSQL облегчается за счет: 1) доступности кодов, документации и сведений по развитию системы; 2) размещения средств управления БД на WEB-сервере при минимальных требованиях к программному обеспечению пользователя (архитектура “клиент—сервер”); 3) развитых средств визуального проектирования БД, что для пользователя исключает необходимость в специальных знаниях по компьютерной технологии.

Типы данных. Возможности БД PostgreSQL определяются типами данных, используя которые, эксперт может создавать сложные структуры и варьировать их в зависимости от наноформы. Выделяются семь основных типов, перечисленных в табл. 2.

Основой построения произвольных по сложности и варьируемых логических структур является “блок данных”. Представляет собой упорядоченную последовательность атрибутов, каждый из которых может иметь любой тип данных. Например, блок “метаданные” на рис. 2, являясь составным, включает шесть атрибутов, из которых первые пять являются простыми, а последний (“представление данных”) — составным. Варьировать структуру можно, наращивая число атрибутов или заменяя элемент на блок данных.

Таблица 2. Возможные типы данных, используемых в DATA_N

Элемент данных	Неделимая числовая или текстовая запись.
Блок данных	Составной тип данных, объединяющий фиксированное число данных любого из перечисленных типов, включая и сам “блок данных”.
Элемент классификатора	Один из элементов перенумерованного списка значений, который может принимать некоторое понятие (подробнее см. ниже).
Интервал значений	Область равномерного распределения величины, ограниченная минимальным и максимальным значениями.
Таблица	Тип данных, используемых для представления одномерных или двумерных массивов. При определении фиксируется число строк и столбцов. Для одномерных массивов число строк равно 1.
Файл	Файл произвольного формата, в БД рассматривается как неделимая единица хранения. Используется для представления полнотекстовых документов, графиков, исполняемых файлов (exe-файлов).
Ссылка на внешний источник	Единицей хранения является адрес хранения документа в сети Интернет. Используется для тех же целей, что и файл, рассматриваемый как единица хранения в БД.

Таблица 3. Наноструктуры, представленные в БД DATA_N

Фуллерены	C_n	28	32	44	50	56	60	70	76	84	90	94
Фуллериты	$C_n(c)$	28	32	44	50	56	60	70	76	84	90	94
Фуллериты (полимеризованные)	$[C_{60}]_n$	кристалл димера $[C_{60}]_2$		одномерная орторомбическая фаза				двумерные фазы				
								ромбоэдрическая		тетрагональная		
Нанокластеры алмаза и графита		наноалмаз			нанографит			наноалмаз с графитовой оболочкой				

Скажем, для полного раскрытия понятия “конфигурация” может понадобиться целая структура, включающая числовые, текстовые и графические элементы.

Другой тип данных, формализующий качественную информацию, – элемент классификатора. Классификатор создается как перенумерованный перечень понятий, которые могут принимать конечный набор значений (см., например, табл. 1). Классификаторы позволяют упорядочить понятия, исключая произвол в их написании и толковании. С их помощью организованы списки единиц измерений, топологических индексов, классов объектов, классов свойств, методов измерений и/или оценок и т.п. Классификатор является основным инструментом при организации данных по перспективным технологиям, позволяя создать списки с детальным описанием возможных приложений, с последующей ссылкой на имя классификатора и номер позиции в списке.

ТЕКУЩЕЕ СОДЕРЖАНИЕ БД

На данном этапе БД содержит фонд данных по фуллеренам, их конденсированным фазам и наноалмазу. Критерием выбора компонентов была доступность термодинамических свойств и возможность обработать технологию хранения при

разных формах представления и номенклатуры характеристик.

В первых двух строках табл. 3 только для C_{60} и C_{70} в литературе представлен объем информации, достаточный для того, чтобы рассчитать типовые термодинамические таблицы, не отличающиеся по формату от тех, что приведены в термодинамических справочниках. В основу расчетов положены термохимические величины и надежная информация по отнесению колебательных частот [18]. Для фуллеритов C_{60} , C_{70} функции оценены по результатам измерений теплоемкости и энтальпий фазовых переходов. Для обоих фуллеритов найдены 3 полиморфные модификации и определены температуры и теплоты фазовых переходов. Вблизи 0 К оба фуллерита сохраняют остаточную энтропию порядка 5 Дж/(моль К). При этом C_{60} находится в стеклообразном состоянии, а C_{70} остается в виде моноклинной фазы. Осложняющий момент для C_{70} – зависимость фазового состояния от предыстории образца. Так, при высоких температурах кристалл может иметь как гексагональную, так и гранецентрированную решетку. Со временем доминирует гранецентрированная решетка, хотя примерно 10–20% образца по-прежнему имеет гексагональную решетку. При охлаждении происходит частичное замора-

живание вращательных степеней свободы и кристалл переходит в ромбоэдрическую либо искаженную гексагональную структуру, относительное содержание которых зависит от условий проведения эксперимента. Измерения теплоемкости C_{60} проведены до температуры 560 К, для C_{70} — до 340 К. Экстраполяция на высокие температуры осуществлена расчетным методом с учетом вкладов от внутримолекулярных и решеточных колебаний. Таблицы, приведенные в БД для этих фуллеритов, ограничены температурой 1000 К. Уже в этом примере проявляются отступления от типовой структуры, принятой, например, в БД ИВТАНТЕРМО или NIST за счет остаточной энтропии и смешивания фаз в пропорции, зависящей от предыстории образца.

Для других C_n ($n \neq 60, 70$) структура данных отличалась за счет использования интерполяции [19, 20] между малыми кластерами $C_2 - C_5$ и фуллеренами C_{60}, C_{70} , что не позволило выявить фазовый состав и свойства при температуре ниже 298.15 К. В этом случае набор данных включал термодинамические константы при 298.15 К и уравнение для теплоемкости. Для полимеризованных модификаций фуллерита (третья строка в табл. 3) в работах [21, 22] проведены исследования, позволившие рассчитать термодинамические таблицы в стандартной форме, такой же, как и для фуллеритов C_{60}, C_{70} . Здесь причиной вариации структуры является объем данных. Для кристаллического димера их оказывается достаточно для расчета вплоть до 394 К, в то время, как для одномерной и двумерных фаз данные ограничены только значениями энтальпии и энтропии полимеризации, что дает оценку функций лишь при 298.15 К.

Данные из DATA_N хорошо иллюстрируют зависимость логической структуры не только от вида объекта, но и от стандартов, принятых в той или иной научной школе. Для фуллеренов данные получены методами химической термодинамики, в то время как для наноалмазов данные приводят в форме, принятой в физике высоких давлений. Вместо стехиометрической формулы для идентификации используются размер и морфология. Отличие в термодинамических свойствах от макроскопических аналогов здесь определяет поверхностная энергия, зависящая от размера и вида частицы [23]. При этом для доминирующего компонента (наноалмаз с графитовой оболочкой) приходится учитывать две границы раздела: графит—воздух и алмаз—графит. В совокупности возникает необходимость в привлечении уникальных данных, характерных именно для этого типа наноформ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулированы общие принципы организации БД по свойствам наноразмерных объектов и описана конкретная реализация для хранения наноформ углерода. Особенность таких БД — вынужденные вариации логической структуры, зависящие от вида объектов и формы представления, использованной в различных источниках. Типовая структура данных обладает “устойчивым каркасом” и одновременно способна к настройке на предметную область с возможностью произвольного расширения номенклатуры идентификаторов и свойств. Для наноуглерода идентификация проводится по топологии, гибридизации связи и комплексу морфологических признаков. Текущее содержание БД представлено термодинамическими свойствами фуллеренов, их конденсированных аналогов и частиц наноалмаза. На этом массиве показано, что инструментарий БД вполне приспособлен к тому, чтобы в концентрированной форме хранить и распространять данные практически любой структуры, адекватно передающие специфику любой из известных и вновь синтезированных форм наноуглерода.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 10-08-00623а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Покропивный В.В., Ивановский А.Л.* Новые наноформы углерода и нитрида бора // *Успехи химии*. 2008. Т. 77. № 10. С. 899.
2. *Беленков Е.А., Ивановская В.В., Ивановский А.Л.* Наноалмазы и родственные углеродные наноматериалы. Компьютерное материаловедение. Екатеринбург: УрО РАН, 2008. 169 с.
3. *Зиатдинов А.М.* Строение и свойства нанографитов и их соединений // *Рос. хим. журн.* 2004. Т. XLVIII. № 5. С. 5.
4. *Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А.* Роль метаданных в создании и использовании информационных ресурсов о свойствах веществ и материалов // *Научно-техническая информация. Сер. 1. Организация и методика информационной работы*. Ежемес. науч.-техн. сб. 2008. № 11. С. 13.
5. *Бартунов О.* Что такое PostgreSQL? (http://www.citforum.ru/database/postgres/what_is/).
6. *Шенинг Г.Ю., Гешвинде Э.* Разработка WEB-приложений на PHP и PostgreSQL. Руководство разработчика и администратора. М.: ДИАСОФТ, 2003. 598 с.
7. www.thermophysics.ru/data_n.
8. *Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А., Фокин Л.Р.* Логическая структура физико-химических данных. Проблемы стандартизации и обмена численными данными // *ЖФХ*. 2008. Т. 82. № 1. С. 20.
9. *Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А., Фокин Л.Р.* Технология построения открытой БД по свойствам наноразмерных объектов. Теплофи-

- зические свойства веществ и материалов // Тр. XII Рос. конф. по теплофизическим свойствам веществ. 7–10 окт. 2008. / Ред. Новиков И.И., Рошупкин В.В. М.: Интерконтакт; Наука, 2009. С. 123.
10. *Гринеv М.* Системы управления полуструктурированными данными // Открытые системы. 1999. № 05-06.
 11. *Когаловский М.Р.* Энциклопедия технологий баз данных. М.: Финансы и статистика, 2002. 798 с.
 12. *Суздалев И.П.* Нанотехнология: физикохимия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: URSS, 2009. 589 с.
 13. *Pokropivny V.V., Skorokhod V.V.* New Dimensionality Classifications of Nanostructures // Physica E. 2008. V. 40. № 7. P. 2521.
 14. *Heimann R.B., Eysvukov S.E., Koga Y.* Carbon Allotropes: a Suggested Classification Scheme Based on Valence Orbital Hybridization // Carbon. 1997. V. 35. № 10–11. P. 1654.
 15. *Hu Y., Shenderova O.A., Brenner D.W.* Carbon Nanostructures: Morphologies and Properties // J. Computational and Theoretical Nanoscience. 2007. V. 4. № 2. P. 199.
 16. Guidelines for Evaluating and Expressing the Uncertainty of NIST Measurement Results // NIST Tech. Note 1297. 1994.
 17. *Даниленко В.В.* Особенности конденсации углерода в детонационной волне и условия оптимального синтеза наноалмазов // Сверхтвердые материалы. 2006. № 5. С. 9.
 18. *Дикий В.В., Кабо Г.Я.* Термодинамические свойства фуллеренов C_{60} и C_{70} // Успехи химии. 2000. Т. 69. № 2. С. 107.
 19. *Моисеев Г.К., Ватолин Н.А.* Термодинамические свойства некоторых газообразных фуллеренов // ЖФХ. 2002. Т. 76. № 2. С. 217.
 20. *Моисеев Г.К., Ватолин Н.А.* Оценка термодинамических свойств ряда конденсированных углеродных соединений // ЖФХ. 2002. Т. 76. № 3. С. 424.
 21. *Маркин А.В., Смирнова Н.Н., Лебедев Б.В. и др.* Термодинамические и дилатометрические свойства димерной фазы фуллерена C_{60} // ФТТ. 2003. Т. 45. № 4. С. 761.
 22. *Маркин А.В.* Термодинамика кристаллических полимерных наноструктур фуллерена C_{60} . Дис. ...канд. хим. наук. Нижний Новгород: Нижегород. гос. ун-т им. Н.И. Лобачевского, 2004. 213 с.
 23. *Даниленко В.В.* Энергетика частиц детонационных наноалмазов // Сверхтвердые материалы. 2006. № 6. С. 3.