

Varia

Електронни средства за съхранение и достъп до минераложка информация

Томас Керестеджиян, Радостина Атанасова

Kerestedjian, T., R. Atanassova. 1999. Electronic tools for storage and access to mineralogical data. – *Geochem., Mineral. and Petrol.*, **36**, 149-155

Abstract. The paper offers a brief review of some examples of mineralogical data bases available in the Internet or commercially, according to the authors experience. It also includes some considerations on the new information reality available nowadays and its consequences for the mineralogical research practice.

Keywords: mineral data base, Internet, software

Address: Geological Institute, Bulgarian Academy of Sciences, 1113 Sofia, Bulgaria;

E-mail: thomas@geology.bas.bg

Ключови думи: минераложки бази данни, Интернет, софтуер

Адрес: Геологически институт, Българска академия на науките, 1113 София

Увод

С масовото използване на компютрите в научно изследователската практика и глобалното развитие на Интернет се създава една нова реалност в областта на научната информация. Тази реалност предлага принципно нови възможности и в областта на минераложката информация. Електронните средства за съхранение и достъп до данни имат редица преимущества пред конвенционалната печатна форма, а именно:

1. Информацията в базите данни по правило е по-съвременна от тази в справочните печатни издания, тъй като се актуализира непрекъснато.

2. В актуализацията на тази информация участва цялата минераложка общност, тъй като всички мрежово достъпни бази данни са отворени за предложения от страна на потребителите.

3. Достъпът до данните се осъществява чрез удобни потребителски диалогови прозорци (интерфейси) за търсене. Те позволяват формулирането на запитвания по сложна комбинация от критерии. По такъв начин се осигурява извличането на информация, максимално съответстваща на зададения въпрос. Такава информация принципно може да бъде получена и при ползване на печатни средства. Нека например си представим колко време би ни отнело запитване като: всички платинови минерали с отн. тегло между 7 и 8 и отразителна способност над 60%. При ползване на минераложка база данни отговорът на този въпрос отнема секунди. От тук произтича и следващото преимущество.

4. Лекотата и бързината на достъп до информацията позволяват изследователят многократно да отправи различни свързани въпроси като по този начин максимално осветли интересувания го проблем. При ползване на печатни средства авторът несъзнателно се ограничава поради трудоемкостта и продължителността на търсене.

5. Характерно за информацията получена от дадена база данни е нейната изчерпателност. При използване на печатни средства винаги съществува рискът нещо да бъде пропуснато.

6. Компактност. Например, известният девет томен Атлас на кристалните форми на Голдшмид се събира на два CD-ROM, въпреки, че основният обем от информация е графичен. Текстова информация с такъв обем би се събрала на по-малко от един CD-ROM. Ползването му е много по-лесно и ефективно.

7. Представянето на минераложка информация, която по традиция винаги е била особено зависима от визуализацията, е възможно с всички средства на мултимедията.

Този обзор има за цел запознаване на българската минераложка общественост със съвременните възможности, за достъп до минераложка информация. Авторите са далеч от претенцията за изчерпателност и вместо това предлагат на читателя някои най-добри примери в тази област, въз основа на личния си опит. В последната част на статията се предлагат и някои допълнителни програмни средства, особено полезни в минералогията, по лична преценка на авторите.

Поради спецификата на статията, почти всички цитирани източници са базирани в Интернет. При цитирането на такива източници в списъка на литературата сме се придържали към International Standard ISO 690-2 (1999), както препоръчва Стефанов (1999).

Специализирани минераложки бази данни

Бази данни свободно достъпни в Интернет

Това са бази данни с минераложка информация, организирана като WEB страници. Те могат да се намерят или по име на минерал или чрез формуляр за търсене по определен критерий. Последният най-често е базиран на сървърна CGI скрипт. Известните ни бази данни от този вид са достъпни безплатно.

Mineralogy Database in HTML Format. Тази база данни съдържа повече от 5000 WEB страници с минераложка информация за 4102 минерални вида. Минералите могат да се търсят по: кристален клас (има кратки, добре написани обяснителни статии за всички основни понятия, има и добре илюстрирани статии за кристалографските особености на всяка сингония); по три основни рентгенови линии; по химичен състав, като търсенето е ограничено до един елемент (по избрания елемент се появява списък от минерали с това свойство); по систематични групи, по новата класификация на Dana (Gaines *et al.*, 1997) и по класификацията на Strunz (Strunz, 1970); по физични и оптични свойства, като търсенето е ограничено отново до едно свойство. Може да се търси и по минерално име, като в този случай за всяка буква от азбуката се появява списък от минерални имена, започващи с тази буква.

Базата данни съдържа двадесет качествени фотографии на минерали. Може да бъде разгледана на един от шест възможни езика и съдържа препратки към множество други основни минераложки бази данни.

За всеки отделен минерал могат да бъдат намерени следните данни:

1. Обща информация. Химична формула, молекулно тегло и разпределение в тегл.% за всеки елемент, годината на утвърждаване от Международната минераложка

асоциация (ИМА), произход на минералното име и синоними.

2. Класификация. Класификационното положение по новата класификация на Dana и по класификацията на Strunz с препратки към съответния класификационен раздел.

3. Кристалографски данни. Осно отношение, параметри на елементарната клетка, кристален клас на симетрия и пространствена група и трите основни рентгенови линии.

4. Физични свойства. Цепителност, цвят, плътност, характер на кристалната повърхност, хабитус, твърдост, луминесцентни особености, блясък и цвят на чертата.

5. Кратка литературна справка.

За по-разпространените минерали има и аудио клип с произношение на минералното име.

Базата данни е представена от Varthelmy (1999).

Athena е минераложка база данни с автор Regoud (1999). Минералите в базата данни могат да бъдат търсени по минерално име (утвърдено от комисията за нови минерали и минерални имена към IMA - CNMMN) в азбучен списък. Има също списъци на синоними на минерални имена и систематично положение в класификацията на Strunz. Базата данни има отделна търсеща WEB страница, където могат да се дефинират запитвания по минерално име, по елементи или химична група. Много полезна е възможността за изключване на дадени елементи или група и възможността за търсене по находище, където даден минерал е намерен за първи път.

Базата данни съдържа богата колекция от качествени минерални изображения, с акцент върху по-рядко разпространени минерали.

The Mineral Gallery (1999) е предимно колекционерски ориентирана база данни с дълъг списък от минерали, които могат да бъдат търсени по име или систематична група. Макар доста подробна информацията в тези полета е трудна за възприемане, поради "недружелюбния интерфейс". Търсенето в базата данни става по списъци

от минерални имена, групирани по свойства и по азбучен ред. Групираните свойства са: химична група, цвят, черта, твърдост, кристална симетрия и класификационно положение по новата класификация на Dana. За всеки отделен минерал, информацията е представена в следния ред: химична формула, състав, цвят, черта, твърдост, кристални форми и морфоложки особености на индивидите и агрегатите, прозрачност, относително тегло, блясък, цепителност, отделност, лом, синонимика, разновидност, приложение, диагностични белези и разграничение от най-близките по свойства минерали, характерни асоциации, типови находища, както и редица характеристики с колекционерско значение - рядкост, търсене и др.

Макар ориентирана главно за колекционерски нужди, информацията е професионално представена. Всички понятия в структурата на базата данни са добре обяснени с препратки към дефинициите. Базата данни съдържа богата колекция от фотографии на налични в момента образци за продан.

Biret (1999) е предложил база данни *Mineralogy*. В базата има списъци от кристалографска информация - параметри на елементарната клетка, информация за симетрията, пространствена група, физичните и оптични свойства на минерали. Акцентът на тази страница е подробен курс по кристалография.

Virtual Atlas of Opaque and Ore Minerals in Their Associations на Ixer and Duller (1999) е WEB страница с добре илюстриран курс по рудна минералогия. За всеки минерал са представени висококачествени микрофотографии, показващи оптични характеристики и отношения с характерни асоциирани минерали, както и детайлно текстово описание.

Комерсиални бази данни

Комерсиалните бази данни са търговски продукти, които съдържат минераложка информация. Разпространяват се на CD-ROM и са достъпни срещу заплащане.

Подробна информация за съдържанието и формата на представяне, както и начините за поръчване и заплащане фирмите предлагат на фирмените си WEB страници.

Базата данни *Mineral* на Nickel and Nichols (1999) съдържа информация за над 4800 минерала. Разпространява се от компанията Alerph Enterprise. Търсенето може да се извърши по минерално име, статус на утвърждаване от CNMMN, химична формула, включително химична група, твърдост, плътност, клас на симетрия, пространствена група, брой формулни единици, параметри на елементарната клетка, осно отношение и обем на елементарната клетка, по номер на картичката в каталога Powder Diffraction File (PDF), по име на минерална група, по класификационно положение по Strunz, по типове находище, по осем най-характерни рентгенови линии.

Базата данни съдържа значителен брой фотографии на минерали. Допълнителното поле за всеки минерал включва кратка библиографска информация. Основният недостатък на продукта е софтуерната му обвързаност с file maker – операционна среда, която “влиза в конфликт” с някои продукти на Microsoft. Бидейки дългогодишен член на комисията за нови минерали и минерални имена към IMA, единият от авторите (E. Nickel) осигурява най-актуалната в номенклатурно отношение информация за всеки минерал.

MDAT на Hoeltzel (1999) е база данни съдържаща информация за 4200 минерала, 73000 единици за библиография. Програмата работи под DOS, а съкратената ѝ версия MDAT-lite за Windows съдържа цялата информация на MDAT, но е лишена от гъвкавата търсеща система. Отделни продукти на същия автор Chem PDF, Chem NIST са насочени изключително към търсене по съответствие на рентгенови и химични данни. Тези критерии излизат извън полето на минералогията и са адаптирани за нуждите на химията. Основно достойнство на тази база данни, е

изключително детайлната библиографска информация за всеки минерал.

Основните полета за информация, за всеки минерал съдържат: систематично положение по Strunz, синонимика, химична формула, количествени химични анализи в тегл.%, твърдост по Моос и Викерс, клас на симетрия, пространствена група, обем на елементарната клетка, до шеснадесет характерни рентгенови линии с интензитети, коефициент на лъчепречупване, двуотражение, оптически клас с 2V, цвят, цвят на чертата, разтворимост и библиография.

Geolib на Yorgensen (1999). Тази база данни съдържа информация за минерално име, систематично положение по Strunz или по Dana, клас на симетрия, химична формула, хабитус, цвят, черта, цепителност, твърдост, плътност, библиографска информация и богата колекция от фотографии на повечето минерали. Значителна част от информацията е предназначена за колекционери. Има възможност за търсене по минерално име и някои от изброените полета с данни, но търсещата подпрограма е слабо място на продукта. В процес на разработване е динамично представяне на кристалните структури и форми, но наличната на пазара в момента версия не предлага тази възможност.

Специализирани кристалографски бази данни

За разлика от минераложките бази данни, част от мрежово достъпната кристалографска информация изисква заплащане.

Комерсиални бази данни

PDF на Международния център за дифракционни данни (ICDD) е най-професионалният продукт в тази област. Българската минераложка общественост е добре запозната с печатната му версия. Последната компютърна версия PDF 2 съдържа информация за 70000 записа на експериментални данни и 42000 симулирани диаграми, отговарящи на

информацията в томове 1 до 49 от печатното издание. Разпространява се на CD-ROM заедно с търсещ интерфейс за Windows – PCPDFWIN 2. 02. Интерфейсът позволява търсене в субфайлове, (включващи субфайл *минерали* от конкретен интерес за минералога) по химичен състав и други свойства (характерни рентгенови линии, кристална сингония и клас, физични данни, литературен източник и качество на данните). Освен индексирания списък на междуплоскостните разстояния и интензитетите, картичката предлага данни за химична формула, минерално и химично наименование, структурна формула, сингония и пространствена група, физични данни и литературна справка, а също и графично представяне на рентгеновата картина като шрих диаграма.

Друг информационен продукт на ICDD е базата данни със структурна информация - *International Crystal Structure Data base* (ICSD), разработвана от Института по информатика в Karlsruhe и ILL института в Гренобъл. Съдържа данни за 45000 неорганични кристални структури и се разпространява на CD-ROM и в Интернет. Мрежовата версия е достъпна чрез заплащане на абонаментна такса, а около 5% от информацията е със свободен достъп като демо версия. Информацията за отделна кристална структура е достъпна по минерално име или име на химичното съединение или химична формула, по кристалографски данни, R – фактор, библиографски данни и др. Тя съдържа: атомни координати, параметри на елементарна клетка, еквивалентни позиции по Wyckoff, оператори на симетрия и подробна библиографска справка. Указва се също и находището на минералния образец, по който е определена структурата.

Свободно достъпни мрежови бази данни

American Mineralogist Crystal Structure Database (1999), Минераложкото дружество на

Америка (MSA) предоставя данните от всички публикации за кристална структура в списанието започвайки от 1915 година. Информацията може да бъде търсена по заглавие, автор, брой на списанието или име на минерал. Данните включват атомни координати, параметри на елементарна клетка от всяка публикация, включена в библиографската справка.

Групата CAOS/CAMM в католическия университет на Наймейхен, Холандия наред с основното си постижение - WEB 3-dimensional (3D) версия на International Tables for X-ray Crystallography, поддържа и база данни *CSECM* (1999). Тя съдържа огромен брой структурни данни за химични съединения (атомни координати, параметри на елементарната клетка и литературна справка за източника на данните), в това число и минерали. Недостатък на базата данни е, че тя е разработена предимно за химици и търсенето по минерално име, най-често е неуспешно, въпреки, че информацията за търсения минерал е налична. За успешно търсене трябва да се въведе химично название на съединението, което за повечето минерали е сериозно затруднение. Друг недостатък е тежката софтуерна организация (всяко запитване стартира нов локален сървър за клиента), което при бавен мрежов достъп води до “увисване” на сесията. След намирането на съответната структура програмният пакет на страницата предоставя възможност за автоматично генериране на VRML файл за динамично представяне или статично растерно изображение. Съществуват възможности за представяне на структурата в различни граници (брой елементарни клетки, слоеве, молекули).

Други софтуерни средства приложими в минераложката работа

Съществува огромен брой повече или по-малко професионални програми полезни във всекидневната работа на минералога. В следващите редове предлагаме няколко от

тях, които по лична преценка на авторите са най-добри образци от този вид.

SPG – Space Group Explorer на Grosse-Kunstleve (1999). Това е малка самостоятелна програма, свободно достъпна от цитирания адрес, която представя в много удобен и компактен вид информацията от International Tables for X-ray Crystallography. Опция на интерфейса позволява представянето на данните във вида на изданията съответно от 1965 и 1983 год. Търсената пространствена група може да се намери чрез въвеждане символа по Herman-Mauguin или Hall или чрез номера на пространствената група.

MinAbs с автор Susse (1999) е много компактна база данни (под 2 Mb) съдържаща пълна справка (над 20000 препратки) на резюмета от Mineralogical Abstracts, започваща от първи том на изданието и актуализирана до днес. Данните могат да се търсят по минерално име, кристален клас и сингония, параметри на елементарната клетка, анионна и катионна част и тип на публикацията. За съответстващите на запитването минерали се получава списък от номера на томове и резюметата, а за по-старите томове - номер на страницата, както и някои допълнителни данни, обозначени с кодови съкращения. Базата данни е достъпна срещу заплащане от посочения адрес.

WebElements (1999) е професионално изработена WEB страница с изключително подробен списък от данни за всеки химичен елемент, избираем от графичното изображение на Менделеевата таблица. Освен обичайните данни – атомен номер и тегло, класификационно положение и др., тук могат да се намерят и по-рядко представяни данни като електронна структура, енталпия, ефективен ядрен заряд, свързваща енергия, атомни и валентни радиуси, електронен потенциал, електроотрицателност, енергии на електронни преходи, списък от изотопи. Всички данни са добре систематизирани в рубрики като електронни свойства, физични свойства, кристалография, съединения и

употреба. В някои рубрики, например кристалография информацията е визуализирана с динамични 3D средства.

Stereo Net u Tri Draw на Hualde (1999) са малки самостоятелни програми за графично изобразяване на данни, съответно в стереографска мрежа и триъгълна диаграма, свободно достъпни от адреса в Интернет.

Изключително професионален пакет от малки самостоятелни програми, работещи под DOS или Java е разработен от Weber (1999) и свободно достъпен от адреса в Интернет. Пакетът съдържа програми за генериране и визуализация на кристални структури и форми, за генериране на стереографски проекции, индексирание на лауеграми, симулация на прахови и монокристални дифракционни картини, за изчертаване карти на електронната плътност, както и много други полезни програмни средства.

За обработване на рентгенови данни и разшифроване на кристални структури съществуват десетки различни (в това число високо професионални) програми, чието разглеждане излиза далеч извън рамките на тази публикация. Тук ще упоменем само адреса на WEB страница, съдържаща огромен, но далеч не изчерпателен списък с препратки към съответните програми: www.ccp14.ac.uk/software/software.html.

Заклучение

Никоя от съществуващите в момента минераложки бази данни не включва всички характеристики, които потребителят би желал да намери. Ето защо, успешната информационна справка би трябвало да съчетае възможностите на различните бази данни. развитието на това информационно направление за момента е в известна степен хаотично. Забелязва се необходимостта IMA да оглави една международна инициатива за стандартизация на процеса на организиране на мрежово достъпната минераложка информация. Добър пример в това отношение са инициативите на Международния кристалографски съюз.

Няма съмнение, обаче, че минераложката информация все повече ще става мрежово базирана и този факт изисква определена информираност и опит на съвременния минералог.

Литература

- Стефанов, Б. 1999. Научните публикации в Интернет. – *Computer*, 7, 49-53.
- Amethyst Galleries, Inc. 1999. - mineral.galleries.com.
- Barthelmy, D. 1999. – web.wt.net/~daba/Mineral
- Biret, F. 1999. - www.dreamtel.fr/mineralogie.
- CSECM. 1999. - www.cmbi.kun.nl/cgi-bin/csecm/csecm.
- Downs, B., P. Heese. 1999. - www.geo.arizona.edu/xtal/cgi/test.
- Gaines, R. V., H. Catherine, W. Skinner, E. E. Foord, B. Mason, A. Rosenzweig. 1997. *Dana's New Mineralogy*. New York, Wiley, 1820 p.
- Goldschmidt, V. 1913-1921, *Atlas der Kristallformen*, Heidelberg, V. 1-9
- Grosse-Kunstleve, R. 1999. - www.calidris-em.com/archive.htm.
- Hoeltzel, Al. 1999. – www.hoeltzel-min.com.
- Hualde, J. 1999. - www.geol.uni-erlangen.de/html/software/winsoft.html.
- International Standard ISO 690-2. 1999. Information and documentation – Bibliographic references – Part 2: Electronic documents or parts thereof. - www.nlc-bnc.ca/iso/tc46sc9/standard/690-2e.htm.
- International Tables for Crystallography. 1987. Vol. A, Second Edition. Dordrecht, Reidel Publ., 880 p.
- Ixer, R., P. Duller. 1999. - www.smenet.org/opaque-ore.
- Nickel, E. H., M. C. Nichols. 1999. - www.alephent.com.
- Peroud, P. 1999. - un2sg4.unige.ch/athena/mineral/mineral.html.
- Strunz H., 1970. *Mineralogische Tabellen*. Leipzig, Acad. Verlag, 621 p.
- Susse, P. 1999. – www.gwdg.de/~psusse/minabs.html.
- WebElements. 1999. - www.webelements.com/index.html.
- Weber, S. 1999. - members.xoom.com/_XOOM/steffenweber/index.html.
- Yorgensen, L. 1999. - www.geosystem.no.

Приета на 18. 11. 1999

Accepted November 18, 1999