

# Депонируемые материалы, идентифицирующие базу данных

Ivan Borisovich Kurpishev / Курпишев Иван Борисович  
Independent Researcher, Kaliningrad / Калининград, me@kurpishev.ru  
2026-05-12

## Титульный лист

Поле	Значение
Название базы данных	KLT-RBD-CHEM: реперно-базовая база данных химических объектов, реакций, материалов и доказательных связей
Краткое обозначение	KLT-RBD-CHEM
Регистрационная точка	KLT-RBD-CHEM-REGISTRY-FIPS-DEPOSIT-BUNDLE v1.3
Правообладатель	Курпишев Иван Борисович / Ivan Borisovich Kurpishev
Автор	Курпишев Иван Борисович / Ivan Borisovich Kurpishev
Год создания	2026
Назначение депонируемых материалов	Однозначная идентификация структуры, состава, логики и контрольных признаков базы данных.

## 1. Идентифицирующая формула

**C@C\_chem -> Rep\_chem(R,I,U;D) -> lambda/CGI -> RBD-graph -> registry deposit status.**

База данных фиксирует химию не как плоский справочник, а как совокупность самостоятельных информационных материалов, систематизированных для машинного поиска и обработки: химический объект, состояние, формула, реакция, материал, условие, источник, доказательное основание, статус связности и правило пересборки.

## 2. Слои разработки

Версия	Модуль	Содержание
v0.1	STRUCTURE	Первичный RBD-слой химии: C@C_chem, Rep_chem, домены, первые Reper-узлы.
v0.2	STRUCTURE+QUANT	Элементы, сбалансированные реакции, ионные уравнения, растворимость, safety-D.
v0.3	REACTION_ENGINE	Парсер формул, баланс массы/заряда, redox half-reactions, CGI rebuild.
v0.4	IONIC_REDOX_GRAPH	Ионные графы, spectator-ion reduction, oxidation numbers, half-reaction pairing.
v0.5	PERIODIC_STRUCTURE_GRAPH	Периодический граф элементов, группы, периоды, блоки, валентности, ионы.
v0.6	COMPOUND_MATERIALS_GRAPH	Соединения, соли, оксиды, кислоты, основания, минералы, материалы.
v0.7	SOLUBILITY_ACIDBASE_MATERIALS_ENGINE	Растворимость, pH, precipitate-check, амфотерность, коррозия.
v0.8	THERMO_KINETIC_MATERIALS_ENGINE	Термодинамика, кинетика, равновесия, температурные окна, material coupling.

v0.9	SPECTROSCOPY_ANALYTICS_EVIDENCE_ENGINE	Спектроскопия, аналитика, Evidence-D, uncertainty, substance identification.
v1.0	INTEGRATED_LAB_KNOWLEDGE_GRAPH	Единый лабораторный граф: вещество -> формула -> реакция -> Evidence-D.
v1.1	PUBLICATION_ATLAS	Публикационный атлас, схемы, таблицы, маршруты публикации.
v1.2	SITE_MONOGRAPH_PUBLICATION_BUNDLE	Пакет сайта и монографии: HTML, DOCX/PDF, download-map, table index.
v1.3	REGISTRY_FIPS_DEPOSIT_BUNDLE	Регистрационный депозит для Роспатента/ФИПС: заявление, реферат, депонируемые материалы, согласия, опись.

### 3. Структура таблиц и информационных элементов

Таблица/слой	Назначение	Идентифицирующие поля
chem_sources	Источники и основания данных	ID источника, тип, ссылка/описание, роль в D-основании
chem_elements	Химические элементы	Атомный номер, символ, период/группа, блок, масса seed-слоя
chem_atoms	Атомные Reper-узлы	Ядро, электронная конфигурация, заряд, состояние
chem_bonds	Химические связи	Тип связи, участники, валентность, условия устойчивости
chem_molecules	Молекулы и вещества	Формула, состав, класс, состояние, связи
chem_reactions	Реакции	Реактанты, продукты, условия, баланс, тип реакции
chem_ionic_redox	Ионные/OBP переходы	Complete ionic, net ionic, spectator ions, half-reactions
chem_solubility_acidbase	Растворимость и кислотно-основной слой	pH, пары кислота/основание, precipitate, amphoteric logic
chem_materials	Материалы и деградация	Минералы, цементные фазы, коррозия, материал-условие
chem_thermo_kinetic	Термодинамика и кинетика	DeltaG, K, rate-law seed, температурные окна
chem_spectroscopy_evidence	Спектроскопия и Evidence-D	Методы анализа, признаки, неопределенность, привязка к Reper
chem_repers	Reper-четверки	R, I, U, D; domain; truth status; lambda/CGI
chem_edges	Графовые связи	source, target, relation_type, evidence, status
chem_gaps	Гар-узлы	Тип разрыва: domain, foundation, balance, charge, method, source
chem CGI_lambda	Проверки связности	lambda, delta_truth, CGI, rebuild action

### 4. Примеры Reper-записей

ID	Объект	Reper-содержание	Статус
CHM-REP-H2O-0001	H2O	R: вещество вода; I: молекулярная структура H-O-H; U: фазы/растворы/реакции ; D: формула, опытные	valid seed

		признаки, справочный слой	
CHM-RXN-ACIDBASE-0001	$\text{HCl} + \text{NaOH} \rightarrow \text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$	R: нейтрализация; I: кислотно-основной переход; U: pH/ионная форма/соль; D: баланс массы и заряда	balanced
CHM-RDX-FE-CU-0001	$\text{Fe} + \text{Cu}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{2+} + \text{Cu}$	R: замещение; I: перенос электронов; U: redox half-reactions; D: oxidation numbers + charge balance	redox checked
CHM-MAT-CORR-0001	$\text{Fe} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$ medium	R: коррозийный риск; I: material degradation; U: влажность/pH/температура; D: условия среды	requires domain

## 5. Машинные форматы

- CSV/JSON: плоские таблицы и обменные индексы.
- SQLite: машинно обрабатываемый реестр слоёв, документов, источников, QA и контрольных сумм.
- XLSX: редакционная карта подачи, таблицы структуры и чек-листы.
- DOCX/PDF: человекочитаемые материалы для проверки и подачи.
- ZIP: транспортный архив с SHA256-контролем.

## 6. Отличительные признаки базы данных

- систематизация химических материалов через событие@состояние C@C\_chem;
- каждый объект снабжается Reper-четверкой R,I,U;D;
- используется отдельный доказательный слой Evidence-D;
- реакции связываются с балансом массы/заряда, ионной редукцией и ОВР-парамии;
- материалы и деграционные процессы связываются с pH, средой, температурой и кинетикой;
- каждый переход получает gap/CGI-статус и правило пересборки при отсутствии домена или достаточного основания.

## 7. Замечание о статье 1334 ГК РФ

Настоящий пакет подготовлен как заявка на государственную регистрацию базы данных. Если заявитель дополнительно захочет заявлять специальную правовую охрану изготовителя базы данных по пункту 3 статьи 1334 ГК РФ, следует отдельно приложить материалы, подтверждающие количественное содержание не менее десяти тысяч самостоятельных информационных элементов и/или существенные затраты на создание базы. В текущем пакете такой режим не заявляется автоматически.

## 8. Source-of-truth и legacy-связка

Source-of-truth для текущей химической RBD-базы:

KLT\_RBD\_CHEM\_SITE\_MONOGRAPH\_PUBLICATION\_BUNDLE\_v1\_2\_PACKAGE.zip, а также производные DOCX/PDF/XLSX/SQLite/HTML/Markdown материалы v1.2. Точка v1.3 добавляет регистрационный контур ФИПС и не изменяет содержательную химию v1.2.

## 9. Контроль идентичности

Контроль идентичности обеспечивается manifest\_v1\_3.json, deposit\_manifest\_v1\_3.csv/json, SHA256SUMS.txt и SQLite-индексом klt\_rbd\_chem\_registry\_fips\_deposit\_v1\_3.sqlite.