

11-14.01.92

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

IX ВСЕСОЮЗНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ХИМИЧЕСКАЯ ИНФОРМАТИКА

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ И ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

Часть I

11—15 января 1992 г.
Черноголовка

ПОИСК ВЫСОКОСЕЛЕКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОНОВ И БАЗЫ ДАННЫХ ПО ТЕРМОДИНАМИКЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ЦИКЛИЧЕСКИХ ПОЛИЭФИРОВ.

Соловьев В.П., Страхова Н.Н., Раевский О.А.

Институт физиологически активных веществ АН СССР,

142432, Черноголовка

Поиск высокоселективных полидентатных комплексонов на основе моделирования структура лиганда - комплексообразующая способность связан с привлечением больших массивов экспериментальных данных по комплексообразованию лигандов. Такие массивы легко могут быть сформированы на основе фактографических и библиографических баз данных. Для этого разработана фактографическая база данных по термодинамике комплексообразования циклических полиэфиров с солями щелочных и щелочноземельных металлов на персональных компьютерах типа IBM PC. База содержит более 4 000 записей. Эти записи включают критически отобранные и табулированные термодинамические данные из 60 различных журналов за период с 1968 по 1988 год. Запись реакции содержит структурную формулу лиганда (макроциклического полиафира), формулы соли щелочного или щелочноземельного металла и растворителя, концентрации лиганда и соли в растворе, ионную силу и посторонний электролит, температуру, стехиометрию реакции, константу равновесия, энтальпию, энтропию, метод определения термодинамических величин и ссылки на оригинальные работы. Возможен машинный поиск всех этих величин и отбор реакций с заданными реагентами и термодинамическими характеристиками. Статистические характеристики базы и данные о ее объеме детально изложены [1].

В дополнение к фактографической базе данных создана библиографическая база данных по термодинамике комплексообразования циклических полиэфиров с солями металлов, содержащая более 1200 записей. Эти записи включают следующие поля: авторы, источник информации, название оригинальной работы, год издания, реферат и номер реферата в Chemical Abstracts. Возможен машинный поиск по любому из этих полей и по их комбинации, используя ключевые слова и логические соотношения между ними.

Используемый язык - ТУРБО-ПАСКАЛЬ.

ЛИТЕРАТУРА.

1. Соловьев В.П., Внук Е.А., Страхова Н.Н., Раевский О.А. // Итоги науки и техники. Химическая термодинамика в равновесии. М.: ВИНТИ, 1991. Т.7. - 373 С.