

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ

4-я МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**ИНТЕГРАЦИЯ
ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
ТЕЛЕКОММУНИКАЦИИ**

17-19 марта 1999 г.



March 17-19 1999

**INTEGRATION
INFORMATION
TECHNOLOGIES
TELECOMMUNICATIONS**

4-TH INTERNATIONAL CONFERENCE

PROCEEDINGS OF THE CONFERENCE

БАЗА ДАННЫХ “СУПРАМОЛЕКУЛЫ” НА ПЛАТФОРМЕ CHEMOFFICE

185

В.П. Соловьев, Н.Н. Кочанова

Институт физиологически активных веществ РАН
ВИНИТИ

THE DATABASE *SUPRAMOLECULES* ON CHEMOFFICE PLATFORM

V.P. Soloviev, N.N. Kochanova

The database SUPRAMOLECULES (SM) functions under WINDOWS 95/98 and it is constructed on the platform Chem Finder Pro 4.0 of automatic development of databases, which is included in the ChemOffice software package of CambridgeSoft Corporation production with using of 3D viewers of chemical structures of WebLab Viewer 2.0 (Molecular Simulations Inc.) type, and original auxiliary subroutines, which were developed in the Borland DELPHI 4.0 (Inprise Corporation). The database SM is structural bibliographic database in supramolecular chemistry. Each record of SM database has the following fields: 2D and 3D structures of substance, title, formula and molecular weight of substance, CAS number and bibliographic data including names of the authors, title of a paper, source, key words, abstract and addresses of the authors. The base allows exact search and search by a fragment of a word or structure on any field, excepting for a field for 3D structures. Now SM database includes data of scientific journals on 1997 and contains about 2000 records.

База данных “СУПРАМОЛЕКУЛЫ” (SM) функционирует под операционной системой WINDOWS 95/98 и сконструирована на платформе автоматической разработки баз данных Chem Finder Pro версии 4.0, входящей в пакет программ ChemOffice производства CambridgeSoft Corporation с использованием 3D визуализатора химических структур типа WebLab Viewer 2.0 (Molecular Simulations Inc.) и оригинальных вспомогательных подпрограмм, разработанных в среде Borland DELPHI 4.0 (Inprise Corporation). База SM является структурно-библиографической базой данных в области супрамолекулярной химии. Каждая запись базы SM имеет следующие поля: 2D и 3D структуры вещества, название, брутто-формулу и молекулярный вес вещества, CAS номер и библиографические данные, включающие имена авторов работы, название статьи, источник, ключевые слова, реферат и адреса авторов. Возможен точный поиск и поиск по фрагменту слова или структуры по любому полю, за исключением поля 3D структур. В настоящее время база SM включает данные научных журналов за 1997 год и содержит около 2000 записей.