



МАТЕРИАЛЫ 7-ой МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

**ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЩЕСТВО
ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ
ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

24-26 октября 2007 г.



october 24-26 2007

**INFORMATION SOCIETY
INTELLIGENT INFORMATION PROCESSING
INFORMATION TECHNOLOGIES**

7-th INTERNATIONAL CONFERENCE

PROCEEDINGS OF THE CONFERENCE

ОБ ИНФОРМАЦИОННЫХ КОМПОНЕНТАХ СТРУКТУРНО-ФАКТОГРАФИЧЕСКОЙ БАЗЫ ДАННЫХ В ОБЛАСТИ КООРДИНАЦИОННОЙ ХИМИИ

Н.Н. Кочанова, М.С. Стуклова, Н.В. Качурина, А. Г. Сухова

ВИНИТИ РАН

В.П. Соловьев

Институт физической химии и электрохимии РАН

ABOUT INFORMATION COMPONENTS OF STRUCTURAL DATABASE IN THE FIELD OF COORDINATION CHEMISTRY

N. N. Kochanova, M.S. Stuklova, N.V. Kachurina, A. G. Sukhova, V. P. Solov'ev

В процессе пополнения структурно-фактографической базы данных в области координационной химии и при анализе поступающей информации о комплексных соединениях из оригинальных источников нами решаются возникающие методологические проблемы, связанные с номенклатурой, регистрацией, хранением, поисковыми средствами и графическим изображением принципиально новых химических структур, а также с внесением, сопоставлением и классификацией новых терминов.

Нами показано [1], что для хранения адекватной информации в базах данных о комплексных соединениях корректное отображение числа и типов координационных нековалентных связей так же необходимо, как и правильное изображение обычных ковалентных связей и их типов. Следует подчеркнуть, что комплексы многих синтетических ионофоров образованы исключительно за счет нековалентных взаимодействий, которые лежат в основе высокоспецифичных природных процессов распознавания и искусственных самоорганизующихся систем, которые могут быть использованы в области нанотехнологий. Данные о координационных связях необходимы для конструирования новых соединений методами химической информатики с использованием субструктурных молекулярных фрагментов [2]. Важны стереохимические данные, в частности, сведения о координационном полиэдре, отражающем пространственное расположение лигандов вокруг центральных атомов, о центрах координации, межлигандных связях в составе комплекса, а форматы хранения данных позволяли бы анализировать сходство координационных соединений с учетом их стереохимических особенностей, в случае, когда таковые известны. Ценность сведений значительно повышают данные о пространственных координатах каждого атома в комплексном соединении [1, 3], водородных связях, ароматических связях, которые могут быть представлены нормализованными и ненормализованными, таутомерами с возможностью их поиска в разных формах. Поскольку координационная сфера комплексного соединения формируется не только ковалентными связями, но и нековалентными взаимодействиями, то информацию о них несут координационные числа (КЧ). КЧ были табулированы нами [3] в зависимости от порядкового номера химического элемента, проанализировано распределение КЧ в зависимости от формальных степеней окисления (СО) химических элементов в разнообразных координационных соединениях. Величины КЧ и их закономерные изменения в зависимости от типа атома и его СО рекомендованы к использованию в поисковых и изобразительных средствах, для контроля надежности структурной информации в химических базах данных в области координационной химии [3].

Литература:

1. Алфимов М. В., Кочанова Н. Н., Колтунова Е. В., Соловьев В. П., Стуклова М. С. Информационная модель координационных соединений. // Корд. химия. - 1995. - Т.21, № 9. - С. 675-679.
2. Varnek A., Fourches D., Hoonakker F., Solov'ev V. P. Substructural Fragments: An Universal Language to Encode Reactions, Molecular and Supramolecular Structures. // J. Computer-Aided Mol. Design – 2005. – V.19, N. 9-10. - P. 693-703.
3. Соловьев В. П., Стуклова М. С., Колтунова Е. В., Кочанова Н. Н. О координационных числах комплексобразователей в комплексных соединениях. // Коорд. химия. - 2003. – Т.29, № 9. - С. 711-720.