



**Информационные
продукты,
процессы и
технологии**

**Information
products,
processes and
technologies**

*Конференция с
международным участием*

HTI-95

Москва, 19 - 20 октября 1995

*Материалы конференции
Proceedings of the conference*

ДОКЛАДЫ УЧАСТНИКОВ ПРОБЛЕМНЫХ СЕКЦИЙ

ГРАФИЧЕСКИЙ ИНТЕРФЕЙС ДЛЯ ВВОДА И ОБРАБОТКИ СТРУКТУРНЫХ ДАННЫХ ПО ХИМИИ

В.Г. Авакян, С.В. Трепалин,
Н.И. Воронжева, Н.И. Чуракова,
И.Н. Шишкина, В.В. Красотченко
*ВИНИТИ РАН (Отделы ИОСХИ
и программного обеспечения базы СД),
Институт физиологически активных
веществ РАН*

Для ввода информации в базу структурных данных (СД) создан графический интерфейс, в основе которого лежит оболочка для банков данных по спектроскопии С.В.Трепалина. Новый интерфейс, работающий в среде "Windows", дает возможность изображать структуры химических соединений, включая стереохимические особенности строения, указывать свойства соединений посредством предметных термов, выбирая их из заранее подготовленных списков, а также изображать химические реакции с участием введенных ранее структур, сопровождая их указанием условий проведения реакций. Библиографические описания могут быть заимствованы либо из базы рефератов, либо введены непосредственно с помощью данного интерфейса.

Введенная информация хранится в виде библиотек документов, в которых возможен поиск соединения по его структуре, названию, брутто-формуле, авторам документа, элементам его библиографического описания и номеру реферата. Возможен также поиск введенных соединений по элементам структуры. Таким образом, указанный интерфейс может служить оболочкой для селектов типа "структура - свойство" или селектов химических реакций. По мере накопления информации, она вводится в базу СД.

Для ввода данных в базу СД создана локальная сеть на сервере SUN 10/512, объединяющая 20 рабочих станций и управляемая лицензионным программным продуктом PC NFS. Работа по созданию графического интерфейса для ввода информации в базу СД поддерживается Российским Фондом Фундаментальных Исследований.

ФАКТОГРАФИЧЕСКАЯ БАЗА ДАННЫХ В ОБЛАСТИ ХИМИИ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

М.В. Алфимов, Н.Н. Кочанова, Е.В.
Колтунова, М.С. Стуклова,
В.П. Соловьев*, О.А. Еремеева
*ВИНИТИ РАН
* Институт Физиологически Активных
Веществ РАН*

Областью интенсивных научных исследований в последние годы является химия макроциклических соединений и их комплексов, которая получила дополнительный импульс благодаря открытию краун-эфиров. Число отечественных публикаций, их объем и качество в области исследования макроциклических соединений и их комплексов возрастает. Так, например, в 1993 г. в России изучением макроциклических соединений и их комплексов были заняты более 320 ученых. В 25 центральных научных журналах опубликовано более 120 работ. Были синтезированы сотни новых лигандов и их комплексов, в итоге за год было получено, исследованы свойства и применение более 700 новых и уже известных соединений с установленным химическим строением.

В целях информационного обеспечения исследований в области химии координационных соединений, на основании предложенной нами химической информационной модели координационных соединений, разработана **фактографическая база данных в области химии макроциклических соединений**. Предложенная химическая информационная модель базируется на трех основных аспектах:

- принципиальная химическая информация, необходимая для представления координационного соединения;
- представление структуры координационного соединения в виде таблицы связей;
- графическое представление комплексных соединений средствами компьютерной техники.

Новый информационный продукт "Российский Краун" реализован в форме фактографической базы данных на персональном компьютере и содержит информацию о макроциклических соединениях и их комплексах из новейшей русскоязычной научной периодики. При формировании БД "Российский Краун"

обрабатывается более 50 научных периодических изданий, выходящих в России и других государствах бывшего СССР, а также русскоязычные диссертации и патенты. База данных включает три основные информационные секции:

1. библиографические данные (поля "название работы", "авторы", "источник")

2. идентификационные данные (поля "регистрационный номер", "химическое название", "молекулярная формула", "молекулярный вес", "молекулярная 2D-структура", "структурные фрагменты")

3. физические, химические и биологические данные (поля "синтез", "физические константы" (температура плавления, температура кипения, плотность, коэффициент отражения и др.), "структура", "спектроскопические, электрохимические и биологические характеристики" (ключевые слова), "термодинамические данные реакций комплексообразования" (константы стабильности, энтальпия, энтропия и т.д.), а также "применение в химической технологии"

Таким образом, для каждого макроциклического соединения и/или его комплекса представлены: название (систематическое и/или тривиальное); структурная формула; бруттоформула; информация о строении (структурные фрагменты); библиография; методы получения и исследования; химические свойства; физико-химические константы; области применения.