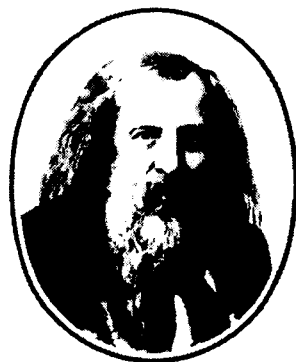


XVI



**МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД
ПО ОБЩЕЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ**

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

**ХИМИЧЕСКАЯ НАУКА:
ВАЖНЕЙШИЕ ДОСТИЖЕНИЯ
И ПЕРСПЕКТИВЫ**

ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ

ХИМИЯ И БИЗНЕС

**ИСТОРИЯ И ДОСТИЖЕНИЯ
ОТЕЧЕСТВЕННОЙ ХИМИИ**

**Удаленный доступ
к структурным химическим базам данных
по сети Интернет.**

**Разработка программного обеспечения
и организация доступа на примере
БД “Макроциклические соединения
и их комплексы”**

В. Г. Авакян, А. О. Айт, А. Н. Петров
Центр фотохимии РАН, г. Москва

Н. Н. Кочанова, Е. В. Колтунова
Всероссийский институт научной и технической информации, г. Москва

С. В. Трепалин, В. П. Соловьев
Институт физиологически активных веществ РАН, Черноголовка, Моск.
обл.

И. И. Баскин
Институт органической химии РАН, Москва

На примере базы данных “Макроциклические соединения и их комплексы”, созданной ранее в ВИНТИ и содержащей данные по структурам, библиографии и свойствам макроциклических соединений (в частности, подандов, краун-эфиров и их комплексов с металлами), разработано программное обеспечение, позволяющее исследователю, имеющему выход в Интернет, со своего компьютера просматривать содержимое базы.

БД функционирует под управлением MS SQL-server. Удаленный пользователь, используя стандартные браузеры Netscape Navigator

3.01 или MS Internet Explorer, через сеть Интернет устанавливает соединение с WWW-сервером Центра фотохимии РАН (www.icp.rssi.ru), на котором хранится БД. После входа на страницу БД “Макроциклические соединения и их комплексы” осуществляется автоматическая загрузка на компьютер пользователя программного обеспечения для поиска данных. Для проведения поиска пользователь заполняет соответствующие строки текстовых запросов и/или отмечает мышью необходимый структурный шаблон. Результатом поиска является набор текстовых строк с полными названиями соединений, включающих выбранный поисковый фрагмент структуры. Отметив необходимую строку, пользователь может просмотреть всю информацию, имеющуюся в БД для данного соединения.

С целью универсализации удаленного поиска структурных данных разработан структурный редактор, загружаемый на компьютер пользователя, использование которого позволит осуществлять поиск всех структур, содержащихся в БД. Также разработан специальный модуль для перевода БД из стандартного формата SDF в формат MS SQL-server, с помощью которого любая химическая БД может быть помещена на MS SQL-server.

Работа поддержана грантами РФФИ: 93-07-18918 и 96-07-89351.