

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 THECOMAC НА ПЛАТФОРМЕ CHEMOFFICE

**В.П. Соловьев, Н.Н.Страхова, В.П.Казаченко,
Н.Н. Кочанова**

Институт физиологически активных веществ РАН
ВИНИТИ

THE DATABASE *THECOMAC* ON CHEMOFFICE PLATFORM

**V.P. Soloviev, N.N. Strakhova, V.P. Kazachenko,
N.N. Kochanova**

The *THECOMAC* (Thermodynamics on Complexation of Macrocycles) database is developed and enlarged under DOS about 10 years. At present the database functions under WINDOWS 95/98 and

it is constructed on Chem Finder Pro 4.0 platform of automatic development of databases, which is included in the ChemOffice software package of CambridgeSoft Corp. production, and with the application of the original auxiliary subroutines developed in the Borland DELPHI 4.0 (Inprise Corp.). We developed the procedure for converting of factual data of database from original table ASCII format in standard SDF (MDL Information Systems, Inc was.) format with using of the Borland Pascal language 7.0. SDF format is available from the Chem Finder Pro environment for data importing in the internal format.

The *THECOMAC* database is chemical factual structural database in the field of complexation thermodynamics of metal cations with macrocyclic ligands in solutions. Each record of database has the following fields: 2D ligand structure, trivial and IUPAC ligand name, formula and CAS number of ligand, complexation equilibrium and thermodynamic characteristics of this reaction (log of stability constant, Gibbs energy, enthalpy, entropy, temperature), additional equilibria, which have been taken into account alongside with main, metal cation of complexation, counter-ion, solvent, reagent concentrations (of ligand and metal cation), ionic strength and the components its creating, experimental method, which allowed to obtain thermodynamic data, comments and bibliographic data including names of the authors and a source. The database allows exact search and search by a fragment of a word or structure and on a range of variables on any field. Now the *THECOMAC* database includes data on 1968-1991 years and contains about 7500 records.

Развиваемая под DOS и пополняемая около 10 лет база данных *THECOMAC* (Thermodynamics on Complexation of Macrocycles) теперь функционирует под WINDOWS 95/98 и сконструирована на платформе автоматической разработки баз данных Chem Finder Pro версии 4.0, входящей в пакет программ ChemOffice производства CambridgeSoft Corp. с применением оригинальных вспомогательных подпрограмм, разработанных в среде Borland DELPHI 4.0 (Inprise Corp.). С использованием языка Borland Pascal 7.0 была разработана процедура конвертирования фактографических данных базы из оригинального таблично-текстового формата в стандартный SDF (MDL Information Systems, Inc.) формат. Последний доступен из среды Chem Finder Pro для импортирования в свой внутренний формат.

База *THECOMAC* является химической структурно-фактографической базой данных в области термодинамики комплексообразования катионов металлов с макроциклическими лигандами в растворах. Каждая запись базы имеет следующие поля: 2D структуру лиганда, его название тривиальное и IUPAC, брутто-формулу и CAS номер лиганда, равновесную реакцию комплексообразования и термодинамические характеристики этой реакции (логарифм константы устойчивости, энергия Гиббса, энтальпия, энтропия, температура), дополнительные равновесия, учтенные наряду с главным,

комплексообразователь - катион металла, его контр-ион, растворитель, концентрация реагентов (лиганда, катиона металла), ионная сила, компоненты, создающие ее, экспериментальный метод, с помощью которого получены термодинамические данные, комментарии и библиографические данные, включающие имена авторов работы и источник. Возможен точный поиск и поиск по фрагменту слова или структуры и по диапазону цифровых данных по любому полю. В настоящее время база *THECOMAC* включает данные за 1968-1991 годы и содержит около 7500 записей.