

**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 “КООРДИНАЦИОННЫЕ  
СОЕДИНЕНИЯ И  
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ” И ЕЕ  
ПРИМЕНЕНИЕ В ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЯХ И ПРИКЛАДНЫХ  
РАЗРАБОТКАХ**

**М.С. Стуклова, Н.Н. Кочанова, О.А. Еремеева,  
Н.В. Качурина, Е.В. Колтунова,  
В.П. Соловьев**  
ВИНИТИ

**DATABASE “COORDINATION  
COMPOUNDS AND COMPLEXATION”  
AND ITS APPLICATION IN  
FUNDAMENTAL AND APPLIED  
RESEARCHES**

**M.S. Stuklova, N.N. Kochanova, O.A. Eremeeva,  
N.V. Kachurina, E.V. Koltounova, V.P. Soloviev**

Database “Coordination Compounds and Complexation” is developing in VINITI. Database is realized on Windows 3.x/95/98 platform on the basis of original software. Original software allows to store, to look through, to search and to print out the following data: formula, 2D structural formula, names of substances, key words, the numbers of abstracts in VINITI Abstract Journal “Chemistry” on section “Inorganic Chemistry. Complex Compounds. Radiochemistry”, bibliographic data. The database is reloaded quarterly. Annual updating is 20 thousands structures. The database is distributed on diskettes and compact discs (CD-ROM). “Coordination Compounds and Complexation” is of interest for the scientists working in the field of fundamental science, in industry, and also for the decision of a wide range of ecological problems.

The database provides a basis for modern researches. It provides for the users unique opportunities of search: 2D structural search and search by 2D structural fragment (exact structure, coordination number of metal and its environment at atomic or molecular level, chelate cycles presence and chelate cycles size etc.); methods of researches (X-Ray, NMR, H-NMR, IR, UV, ESR, Raman spectroscopy, luminescence, dichroism, magnetochemistry, electrochemistry, thermodynamics and kinetics of complexation); unique biological, physiological and pharmacologi-

cal properties; application of coordination compounds in various areas of chemical technology, including analytical application; ecological aspects of complexation (extraction, separation, including clearing from radioactive pollution and heavy metals).

База данных (БД) ВИНИТИ “Координационные соединения и комплексообразование” реализована под WINDOWS 3.x/95/98 на основе оригинальной программной оболочки. Программные средства позволяют хранить, просматривать, проводить поиск и распечатывать следующие данные: 2D структурную формулу вещества, брутто-формулу, название вещества, ключевые слова, номер реферата РЖ Химия, библиографические данные. БД выпускается ежеквартально по разделу сводного тома РЖХ “Неорганическая химия. Комплексные соединения. Радиохимия”. Ежегодное пополнение БД составляет 20 тысяч структур. БД предоставляется на дискетах и компакт-дисках (CD-ROM). БД представляет интерес для ученых, работающих в области фундаментальной науки, для разработчиков технологий, занятых в промышленности, а также для людей, решающих экологические проблемы.

База данных может служить платформой для современных исследований, предоставляя пользователю уникальные возможности поиска информации по различным аспектам: структурный и подструктурный поиск (2D структура, к.ч. металла и его атомное и молекулярное координационное окружение, наличие и величина хелатных циклов); методы исследований координационных соединений (К.С.) (РСА, ЯМР, ЭПР, ПМР, ИК, КР, УФ и др., люминесценция, дихроизм, магнетохимия, электрохимия, термодинамика и кинетика комплексообразования); указание уникальных биологических, физиологических и фармакологических свойств; применение К.С. в различных областях химической технологии и экологии.