



МАТЕРИАЛЫ

5-ой МЕЖДУНАРОДНОЙ
КОНФЕРЕНЦИИ

**ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЩЕСТВО
ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ И ТЕХНОЛОГИИ
ТЕЛЕКОММУНИКАЦИИ**

22-24 ноября 2000 г.

November
22-24 2000

**INFORMATION SOCIETY
INFORMATION TECHNOLOGIES
INFORMATION RESOURCES
TELECOMMUNICATIONS**

5-ти INTERNATIONAL CONFERENCE

PROCEEDINGS OF THE CONFERENCE

ОБ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЕ ПО РАСТВОРНОЙ ЭКСТРАКЦИИ

В. П. Соловьев, Н. Н. Кочанова, А. А. Варнекв,
Г. Випфф
ИФАВ РАН, ВИНИТИ, Лаборатория
Молекулярного Моделирования, Университет
Луиса Пастера

TOWARDS AN INFORMATION SYSTEM ON SOLVENT EXTRACTION

V. P. Solov'ev, N. N. Kochanova, A. Varnek,
G. Wipff

Сообщение касается разработки образца информационной системы по растворной экстракции металлов, включая фактографическую базу данных и экспертную систему для анализа экспериментальных экстракционных данных. Каждая запись базы соответствует одной экстракционной реакции и содержит три информационные части: библиографическую, описание экстракционной системы и экстракционные свойства, включая химическую 2D и 3D структурную информацию для экстрагентов, а также термодинамические и кинетические данные в текстовом, числовом и графическом формах. Графический интерфейс базы данных по растворной экстракции (Solvent eXtraction Database: SXD) был разработан, используя платформу программирования DELPHI для WINDOWS 98/2000/NT. База данных SXD позволяет экспорт/импорт в формат SDF, обрабатывать библиографическую, структурную 2D и 3D информацию и экспериментальные данные, представленные в числовом и графическом виде, и сравнивать данные для различных записей. SXD использует редактор химических структур ISIS Draw или собственный редактор 2D структур, а программу WebLabViewer Lite использует для визуализации и манипуляции 3D структурами. Были разработаны также несколько дополнительных процедур для SXD: конвертеры файлов, которые преобразуют библиографическую информацию различных форматов в формат SDF, графический редактор для оцифровки и ввода данных с графиков и рисунков в базу SXD, химический редактор SXD-Editor для визуализации SDF файлов и объединения текстовой и структурную химической информацию, сравнение графической информации (экспериментальных кривых) для различных записей базы. В качестве альтернативы, мы также подготовили демонстрационные версии экстракционной базы данных, используя коммерческие средства разработки баз данных CheD и ChemOffice/ChemFinder, в которых обработка графической информации была ограничена для наших потребностей.

В качестве экспертной системы мы используем

метод подструктурных молекулярных фрагментов, который был развит и использовался для моделирования и предсказания комплексообразования гость-хозяин, а в настоящее время применен к моделированию растворной экстракции, используя информацию из базы данных SXD. Работоспособность экспертной системы оценена на моделировании и предсказании коэффициента распределения Hg, In и Pt, экстрагируемых 26-ю фосфорилсодержащими подандами, и урана, экстрагируемого 32-мя моно- и триподандами, или 22-мя моноамидами.

This report concerns the design of a prototype of information system for solvent extraction of metals including a comprehensive factual database and an expert system to analyse experimental extraction data. Each database record corresponds to one extraction reaction and contains three information parts (bibliographic, extraction system description and extraction properties) including chemical structural 2D and 3D information for extractants, as well as thermodynamic and kinetic data in textual, numerical and graphical forms. A graphical interface for a Solvent eXtraction Database (SXD) has been designed using DELPHI programming platform for WINDOWS 98/2000/NT.

SXD allows to export, to import in the SDF format and to retrieve bibliographic and structural 2D and 3D information as well as experimental data presented in numerical and graphical forms, and to compare data from different records. SXD uses ISIS Draw or its own editor of 2D structures whereas the WebLabViewer Lite program is used for visualization and manipulation of 3D structures. Several supplementary programs have been also prepared for SXD: file converters which transfer bibliographical information of different formats to the SDF format, the Graphical Digitizer program to input graphs into SXD, the SXD-Editor to visualize the SDF files, and to merge textual and structural information, and the subroutine for comparison of graphical information from different records. As alternative, we have also developed demonstration versions of extraction database using commercial Chemical Database (CheD) and ChemOffice/ChemFinder database developers in which treatment of graphical information is limited compared to SXD.

As expert system we use the Substructural Molecular Fragments method which was developed and used to model host-guest complexation, and at present which models structure-property relationships using information retrieved from the SXD database. Its performance is assessed on the distribution coefficients of Hg, In and Pt extracted by 26 phosphoryl-containing monopodands, and of uranium extracted by 32 mono- and tripodands or by 22 monoamides.