



# 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**

интеллектуального потенциала обучаемого, на формирование умений самостоятельно приобретать знания, осуществлять информационно-учебную, экспериментально-исследовательскую деятельность, разнообразные виды самостоятельной деятельности по обработке информации, создание и использование компьютерных тестирующих, диагностирующих методик контроля и оценки уровня знаний обучаемых и т.д. Информатизация образования как процесс интеллектуализации деятельности обучающего и обучаемого, развивающийся на основе реализации возможностей средств новых информационных технологий, поддерживает интеграционные тенденции процесса познания закономерностей предметных областей и окружающей среды, сочетая их с преимуществами индивидуализации и дифференциации обучения, обеспечивая тем самым синергизм социально-педагогического воздействия.

#### *Литература*

1. Карпова Ю.А. Инновации, интеллект, образование. Монография. // М.: Изд-во МГУЛ, 1998.
2. Кулагин А.С., Михайлов А.И. Об эффективности научно-технического информирования. // М.: ВИНИТИ, 1987.
3. Соколов Н.Н. Общество и телекоммуникационная инфраструктура - тенократический подход. // Информационные продукты, процессы и технологии. Computer-Aided Software and Hardware Engineering. Сборник статей. М.: изд-во "Технология машиностроения", 1998.

### **ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ И РАСЧЕТНАЯ ПОСРЕДСТВОМ ПОДСТРУКТУРНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ФРАГМЕНТОВ ОЦЕНКА УСТОЙЧИВОСТИ КОМПЛЕКСОВ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ ЛИГАНДОВ С КАТИОНАМИ КАЛИЯ И НАТРИЯ В МЕТАНОЛЕ**

В. П. Соловьев, А. Ф. Солотнов, Н. Н. Страхова, В. П. Казаченко, Н. Н. Kochanova, A. A. Varnek , Г. Випфф  
ИФАВ РАН, ВИНИТИ, Лаборатория  
Молекулярного Моделирования, Университет  
Луиса Пастера

### **EXPERIMENTAL AND BY SUBSTRUCTURAL MOLECULAR FRAGMENTS STABILITY ESTIMATIONS OF COMPLEXES FOR MACROCYCLIC LIGANDS WITH SODIUM AND POTASSIUM METAL CATIONS IN MEON**

V. P. Solov'ev, N. N. Kochanova, A. F. Solotnov, N. N. Strakhova, V. P. Kazachenko, A. Varnek, G. Wipff

Константы устойчивости были измерены для комплексообразования катионов натрия и калия с метил-18-краун-6, 2,3-диметил-18-краун-6 и метил-15-краун-5 в MeOH в 298 K. Экспериментальные данные, определенные потенциометрическими титрованиями, были сравнены с предсказанными данными, оцененными методом структурных молекулярных фрагментов (СМФ). Развитый метод основан на топологическом разделении молекулы на фрагменты, и на вычислении их вкладов в заданное свойство. Метод использует два типа фрагментов: последовательности (цепочки) атом/связь и "увеличенные атомы" (атомы с их самыми близкими соседями). Вклады фрагментов в константы устойчивости комплексов были рассчитаны для обучающих выборок из литературных данных для комплексообразования 112 макроциклических лигандов с катионом натрия и 57 макроциклических лигандов с катионом калия в MeOH при 298 K. Обучающие выборки были критически отобраны из пополняемой нами базы данных THECOMAC, которая позволяет экспортить данные в известный молекулярный формат SDF, приемлемый для программы TRAIL, которая была разработана нами в среде DELPHI 5.0, чтобы моделировать взаимосвязи структура - свойство методом СМФ.

Stability constants were measured for the complexation of sodium and potassium cations with methyl-18-crown-6, 2,3-dimethyl-18-crown-6 and methyl-15-crown-5 in MeOH at 298 K. The experimental data determined by potentiometric titrations are compared to validated data, estimated by substructural molecular fragment (SMF) method. The developed method is based on the splitting of a molecule into fragments, and on calculations of their contributions to a given property. It uses two types of fragments: atom/bond sequences and "augmented atoms" (atoms with their nearest neighbors). Fragments contributions in stability constants were calculated for the learning sets on literature data for the complexation of 112 macrocyclic ligands with sodium cation and of 57 macrocyclic ligands with potassium cation in MeOH at 298 K. The learning sets were critically selected from the supplementing THECOMAC database, which allows to export data into SDF format acceptable for the TRAIL program, which has been developed to calculate structure - property relationships using the SMF method.