

Министерство высшего и среднего специального
образования РСФСР
Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского АН СССР
Всесоюзное химическое общество им.Д.И.Менделеева
Калининский государственный университет

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ГРАМЫ В ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ
Тезисы докладов межвузовской конференции

21-26 мая 1990 г.

Калинин 1990

MODEL - ПРОГРАММА ИНТЕРАКТИВНОГО ГРАФИЧЕСКОГО ВВОДА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГРАФОВ

И. И. Баскин, В. А. Палюлин, Н. С. Зефирова

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

В связи с развитием в последнее время различного рода методов прогнозирования свойств и биологической активности органических соединений часто возникает проблема быстрого формирования локальных баз данных в некотором едином формате. В качестве такого формата в последнее время начинает активно использоваться формат "ИСТРА" [1], позволяющий хранить информацию о типах атомов и типах связей между ними, целочисленных зарядах на атомах, числе водородных соседей и координатах атомов (двумерных или трехмерных, в зависимости от версии).

Нами разработана программа MODEL, позволяющая осуществлять удобный и быстрый ввод органических соединений в ЭВМ в виде молекулярных графов (МГ). Программа автоматически расставляет водородные атомы с учетом валентностей ряда элементов, вычисляет брутто-формулу, контролирует валентность. Предусмотрен ввод фрагментов (циклы, цепи), формирование библиотеки фрагментов. В результате работы программы формируется файл в формате "ИСТРА", который удобен для расчетов различных дескрипторов молекул, и файл, содержащий данные о свойствах. Имеется ряд сервисных средств, значительно облегчающих ввод МГ. Программа ориентирована на ЭВМ типа IBM PC XT/AT.

ЛИТЕРАТУРА. 1. Зефирова Н. С., Сапегин А. М., Палюлин В. А., Кумсков М. И., Раевский О. А. "ИСТРА": Интерактивная программная система компьютерного дизайна физиологически активных веществ. // Тезисы докл. VIII Всес. конф. "Использование вычислительных машин в спектроскопии молекул и химических исследованиях". - Новосибирск: НИОХ СО АН СССР, 1989, с. 228-229.