

**Зачет по учебному курсу
"Информационные технологии в химии"
2 семестр**

**а) Перечень вопросов
по теоретической части курса**

1. Регистрационные номера веществ. Принципы использования CAS RN.
2. Линейные нотации. SMILES.
3. Линейные нотации. InChI, InChIKey.
4. Матричная форма отображения молекулярного графа.
5. Таблица соединений (сопряжений).
6. Файлы обмена структурной информацией. MDL Molfile.
7. Структурный код. Одномерные отпечатки пальцев в структурном поиске.
8. Визуальное отображение трехмерной структуры.
9. Молекулярная поверхность.
10. Декартовы и внутренние координаты химических структур.
11. Стандартный формат обмена кристаллографической информацией.
12. Молекулярное подобие, его количественная оценка.

б) Перечень поисковых задач

1. Провести поиск заданного вещества в кристаллографической базе данных и определить численные значения длин связей и валентных углов.
2. Провести структурный поиск заданного вещества в структурной базе данных. Найти методику синтеза этого вещества, проанализировать текст обнаруженного первоисточника.
3. По заданному спектру протонного магнитного резонанса идентифицировать вещество (база данных SDBS).

Составил:
доцент

А. А. Рагойша

Утверждено:
16.05.2017, протокол № 11
заседания кафедры общей химии и
методики преподавания химии