

Код SMILES в поисковом запросе

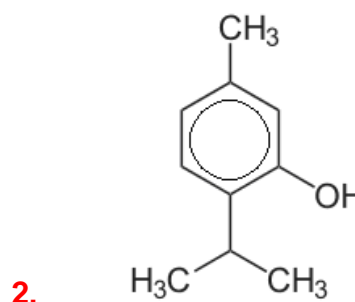
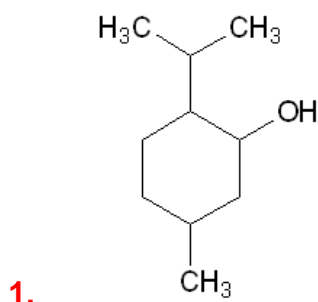
Во многих базах данных поисковое задание можно формулировать в виде SMILES.

При поиске сведений о веществе код SMILES целесообразно использовать в запросе в следующих ситуациях:

- при поиске в текстовых базах данных (где структурную формулу в принципе применить невозможно);
- в структурных базах данных, если код прост в написании (например, легче набрать на клавиатуре строку NCC(O)=O, чем рисовать двумерную структуру глицина);
- в структурных базах данных, если готовый код можно скопировать из другого источника, например, из молекулярного редактора (из-за несовместимости форматов молекулярных редакторов далеко не всегда возможен перенос двумерной формулы; для буквенно-цифровой строки SMILES проблема несовместимости отсутствует в принципе).

Контрольное задание 5. Информационный поиск в базе данных ChemSpider.

Составьте коды SMILES указанных ниже веществ.



Проведите поиск по SMILES-запросам в базе данных ChemSpider.

Используйте простейший поисковый бланк, расположенный на Главной странице.

Справка. Перевод некоторых терминов сайта.

Properties = свойства

Predicted Properties = предсказанные (расчетные значения) свойства

Experimental Properties = экспериментально определенные свойства

Refraction Index = Index of Refraction = показатель преломления

Density = Specific Gravity = плотность.

В базе данных ChemSpider найдите ответы на следующие вопросы:

5а). Как называется вещество № 1?

Чему равно экспериментальное значение показателя преломления этого вещества?

5б). Как называется вещество № 2?

Насколько сильно различаются значения его плотности, определенные экспериментально и рассчитанные теоретически?

Веб-страницы с ответами предъявите преподавателю.