

**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. Файлы обмена структурной информацией. MDL Molfile.
6. Визуальное отображение трехмерной структуры.
7. Молекулярная поверхность.
8. Декартовы и внутренние координаты химических структур.
9. Прогнозирование свойств молекул с использованием принципа аддитивности.
10. Стандартный формат обмена кристаллографической информацией.

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).