

Код SMILES в поисковом запросе

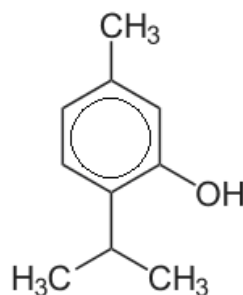
Во многих базах данных поисковое задание можно формулировать в виде SMILES.

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 код SMILES данного вещества:



Проведите поиск по SMILES-запросу 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

Density = Specific Gravity = плотность.

В базе данных **ChemSpider** найдите ответы на следующие вопросы:

5). Как называется заданное вещество?

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

Веб-страницу с ответами предъявите преподавателю.