

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
 Спеціальність Хімія Семестр 9  
 Відділення денне ОКР:  
 Спеціалізація Дизайн матеріалів і хімічна інформатика  
 Навчальна дисципліна: **Хемоінформатика і хеометрія**

Хімічний факультет  
спеціаліст, магістр

### ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ № 1

1. Вимірюючи адсорбцію  $ZnCl_2$  на органо-кремнеземному матеріалі, отримали такі дані:

№ точки	$m_i$	$N_i$	$N_s$
1	0.0501	1.39E-05	5.13E-06
2	0.0502	2.85E-05	1.73E-05
3	0.05	4.23E-05	2.95E-05
4	0.05	5.62E-05	4.36E-05
5	0.0499	7.00E-05	5.77E-05
6	0.0502	7.69E-05	6.41E-05
7	0.0504	8.46E-05	7.05E-05
8	0.0501	1.08E-04	8.08E-05

$m_i$  – наважка сорбенту, г,  $N_i$  – початкова кількість речовини  $ZnCl_2$  у розчині, моль,  $N_s$  – кількість речовини  $CdCl_2$  після досягнення рівноваги, моль. Об'єми розчинів 50 мл.

Користуючись лінеаризованим рівнянням Ленгмюра в координатах  $1/D = f([ZnCl_2])$ , де  $D$  – коефіцієнт розподілу адсорбату між фазами, визначте ефективну ємність адсорбенту та константу адсорбційної рівноваги. Знайдіть робастні оцінки згаданих параметрів. Перевірте адекватність моделі ідеальної адсорбції з застосуванням відомих Вам критеріїв (рівень значущості встановити 3%), використавши рівняння Ленгмюра в класичному вигляді (в якості адсорбційних характеристик використайте знайдені робастні оцінки). Зробіть висновок щодо можливості застосувати модель ідеальної адсорбції до наведених даних. (20 балів).

2. Оберіть такі варіанти висловів, які відповідають вірним судженням (20 балів)

#### 1. Дескрипторний метод опису молекул

- обмежений тільки топологічними (теоретико-графовими) характеристиками молекул
- дозволяє побудувати статистичні моделі біологічної активності
- припускає наявність залежності «властивість-дескриптор»
- припускає наявність нелінійного зв'язку «властивість-дескриптор»
- припускає наявність строго визначеного фізико-хімічного сенсу у кожному дескрипторі
- припускає, що набір дескрипторів повинен бути строго лінійно-незалежним.

#### 2. До дескрипторів молекулярної структури належить

- липофільність
- координати атомів молекул
- дипольний момент молекули
- заряди на атомах в молекулі
- зображення хімічної структури молекули
- топологічні індекси графа молекули
- граф молекули

Затверджено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства,  
 протокол № 8 від 6 грудня 2019 р.

Лектори В.В. Іванов, А.В. Пантелеймонов

Завідувач кафедри О.І. Коробов

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Спеціальність Хімія Семестр 9  
Відділення денне ОКР:  
Спеціалізація Дизайн матеріалів і хімічна інформатика  
Навчальна дисципліна: **Хемоінформатика і хеометрія**


Хімічний факультет

спеціаліст, магістр**3. Факторний аналіз**

- дає рівняння лінійної регресії,
- дає рівняння нелінійної регресії
- дозволяє охарактеризувати тільки ті величини, що піддаються кількісній оцінці у досліді.
- трактує поняття «фактор» і «дескриптор» як тотожні поняття
- припускає, що фізичний (хімічний) сенс фактора завжди чітко визначений
- однозначна математична процедура, яка дозволяє встановити зв'язок між змінними
- припускає, що дослідник внесе свою суб'єктивну оцінку явища

**Опишіть факторну будову задачі яку Ви виконували на практичних заняттях**

Затверджено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства,  
протокол № 8 від 6 грудня 2019 р.

Лектори  В.В. Іванов, А.В. ПантелеймоновЗавідувач кафедри  О.І. Коробов

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
 Спеціальність Хімія Семестр 9  
 Відділення денне ОКР:  
 Спеціалізація Дизайн матеріалів і хімічна інформатика  
 Навчальна дисципліна: **Хемоінформатика і хеометрія**

Хімічний факультет

спеціаліст, магістр

4. до напівемпіричних методів квантової хімії відносяться методи:

MINDO/3,  CISD,  RHF/3-21G,  MP2,  AM1,  PM3,  MM2,  MNDO

5. Повне нехтування диференційним перекриттям використовується в методах

MINDO/3,  CNDO/2,  PM3,  AM1,  RHF/STO-3G.

6. Для розрахунку геометрії та властивостей білкової молекули слід використовувати такі розрахункові методи як

тому, що \_\_\_\_\_

7. Для розрахунку геометрії та властивостей молекули аспірину ( $C_9H_8O_4$ ) можна використовувати такі розрахункові методи як \_\_\_\_\_

тому, що \_\_\_\_\_

8. з указаних методів: MINDO/3, CISD, RHF/3-21++G(d,p), MP2/3-21++G(d,p), AM1, PM3, MM2, MNDO

Найменш за все, для розрахунків QSAR, пристосований квантовохімічний метод (методи)

\_\_\_\_\_ тому що \_\_\_\_\_

Більш за все, для розрахунків QSAR, пристосований квантовохімічний метод (методи) \_\_\_\_\_ тому що \_\_\_\_\_

Затверджено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства,  
 протокол № 8 від 6 грудня 2019 р.

Лектори В.В. Іванов, А.В. Пантелеймонов

Завідувач кафедри О.І. Коробов