

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

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

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 _____