KURS PROGRAMOWANIA W JĘZYKU PYTHON

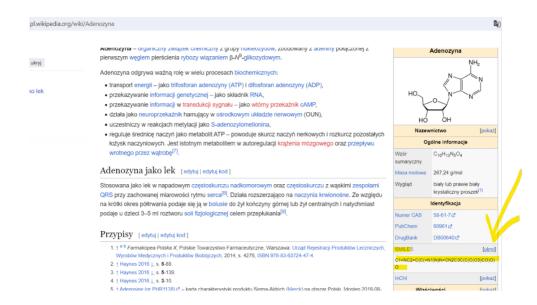
TYDZIEŃ 4 – MODUŁY I BIBLIOTEKI rakit



<u>Instalowanie biblioteki rdkit</u>

pip install rdkit
<u>Importowanie</u>
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import Draw
Zadanie
Za pomocą biblioteki rdkit i sposobu zapisu cząsteczki SMILES utwórz "rysunki" podanych poniżej związków chemicznych (bądź dowolnie przez siebie wybranych możesz pokombinować)
Cząsteczki:
CCCCCC
C1CCC1
CC(=O)CC
CCCCCCC
CCCCICCI

Podpowiedź: SMILES dowolnej cząsteczki można skopiować z wikipedii.



Propozycja wykonania

1. Utwórz obiekt typu lista z powyższymi cząsteczkami.

Pamiętaj, że każdy z zapisów cząsteczek musi być obiektem typu "string", czyli musi być zamknięty w cudzysłowie.

2. Za pomocą pętli przekształć cząsteczki w liście na format mol.

Podpowiedź: stwórz nową pustą listę, do której będziesz dodawać cząsteczki przekształcone na format mol.

Funkcja do przekształcania cząsteczki na format mol: Chem.MolFromSmiles(x)

3. Utwórz pętlę, która będzie iterować po nowej liście z cząsteczkami w formacie mol i "rysować" jej strukturę.

Funkcja do tworzenia rysunku cząsteczki z formatu mol: **Draw.MolTolmage(x)**

Funkcja do pokazywania rysunku: **x.show()**, gdzie x to obiekt, który chcemy wyświetlić.