

KURS PROGRAMOWANIA W JĘZYKU PYTHON

TYDZIEŃ 4 – MODUŁY I BIBLIOTEKI

rdkit



[Instalowanie biblioteki rdkit](#)

```
pip install rdkit
```

[Importowanie](#)

```
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:

CCCCCCC

C1CCCC1

CC(=O)CC

CCCCCCCC

CCCC1CC1

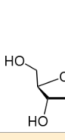
pl.wikipedia.org/wiki/Adenozyna

ukryj

&lt9 lek

- Adenozyna jako lek [edytuj | edytuj kod]

Przypisy [edytuj | edytuj kod]

- | Adenozyna | |
|---|---|
|  | |
| Nazewnictwo | [pokaż] |
| Ogólne informacje | |
| Wzór sumaryczny | C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₄ |
| Masa molowa | 267,24 g/mol |
| Wygląd | biały lub prawie biały krystaliczny proszek ^[1] |
| Identyfikacja | |
| Numer CAS | 58-61-7 [?] |
| PubChem | 60961 [?] |
| DrugBank | DB00640 [?] |
| <div><div>SMILES</div><div><chem>C1=NC2=C(C(=N1)N)=CN2C3C(C(C(=O)O)O)O</chem></div></div> | |
| InChI | [pokaż] |

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