# KURS PROGRAMOWANIA W JĘZYKU PYTHON

TYDZIEŃ 4 – MODUŁY I BIBLIOTEKI rakit



Instalowanie biblioteki rdki	Insta	lowanie	bibliot	teki rd	kit
------------------------------	-------	---------	---------	---------	-----

pip install rdkit

## *Importowanie*

from rdkit import Chem

from rdkit.Chem import Draw

### Zadanie

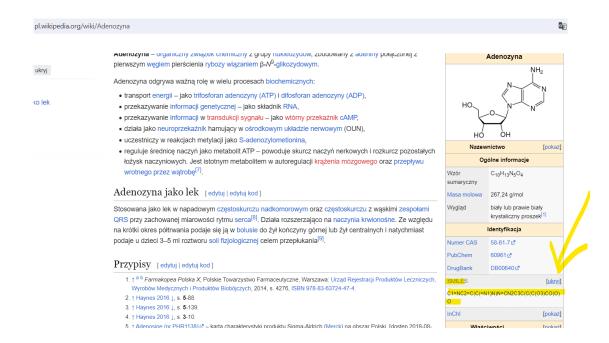
CCCCCCC

CCCC1CC1

Za pomocą biblioteki rdkit i sposobu zapisu cząsteczki SMILES utwórz "rysunki" podanych poniżej związków chemicznych (bądź dowolnie przez siebie wybranych – możesz pokombinować)

Cząsteczki:		
CCCCCC		
CICCCI		
CC(=O)CC		

### 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.