

Контрольная работа

Студент: _____ Факультет _____

1. Основное приближение молекулярной механики:

- Электроны полностью не учитываются
- приближение Борна-Оппенгеймера
- Использование закона Ньютона
- Электроны учитываются не явно

2. Силовое поле это:

- Уравнение для расчёта сила
- Набор параметров для потенциалов
- Электромагнитное излучение
- Набор сил действующих на атом

3. Периодические граничные условия это:

- Периодическая функция
- Способ представления поведения граней ячейки
- Алгоритм контроля давления
- Стенка ячейки

4. Баростат :

- Удаляет молекулы для контроля давления
- Изменяет форму ячейки для сохранения давления
- Увеличивает и уменьшает давление
- Сообщает значение давления в системе

5. Моделирование самосборки структуры белка:

- Невозможно из-за ограничений параметризации
- Возможно при моделировании молекулярной динамики
- Невозможно из-за скорости компьютеров
- Возможно с привлечением людей

6. Фармакофор это:

- Химическая группа
- Лекарственное начало
- Набор расстояний между активными группами лиганда
- Набор структурных свойств

7. Приведите SMILES описание следующих молекул:

- Этанол _____
- Фенола _____
- Хлорида натрия _____