

ЭКСПЕРТНЫЕ СИСТЕМЫ РАСПОЗНОВАНИЯ ВЕЩЕСТВ

для специальности высшего образования второй ступени
1-31 81 02 - Фотоника

Введение. Основные методы идентификации соединений. Предмет и программа курса. Общие сведения о базах данных химических соединений. Краткий обзор основных принципов и этапов развития компьютерных методов идентификации соединений.

Классификация соединений. Современная номенклатура химических соединений. Основные принципы и правила классификации соединений. Традиционная, рациональная и тривиальная номенклатура. Основные правила традиционной номенклатуры органических и неорганических соединений ИЮПАК.

Основные базы данных идентификации химических соединений. Классификация идентификационных баз данных. Общие принципы опознавания известных соединений с помощью информационно-поисковых систем.

Базы данных по масс-спектрометрии. Основные принципы построения. Используемые атласы спектров. Базы данных EPA/NIH/NIST, Мак-Лафферти и др. ТанDEMная масс-спектрометрия (МС/МС): теоретические основы, Method Package. Лабораторные информационно-управляющие системы: Standalone Review Data © HP, Xcalibur Enter_Spec и др.

Базы данных по ИК-спектроскопии. Основные базы данных ИК-спектров: Sadtler, Canadian Scientific Numerical и др.

Базы данных по спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Основные базы данных по ЯМР. Идентификация объектов методами двумерной ЯМР-спектроскопии. Особенности структурной идентификации биополимеров.

Экспертные системы распознавания. Основные принципы функционирования экспертных систем распознавания. Программа Meta-DENDRAL. Алгоритмы идентификации.

Компьютерные средства и методы установления строения неизвестного соединения по спектральным данным. Постановка и формулирование задачи по идентификации неизвестного соединения. Методология решения структурных задач с помощью баз данных и информационно-поисковых систем.

Качественный анализ смесей при хроматографическом разделении. Компьютерный качественный анализ смесей по характеристикам удерживания при хроматографическом разделении. Вероятностная оценка надежности идентификации. Выбор критериев идентификации. Хроматографическая идентификация при многократных испытаниях.

Качественный спектральный анализ неразделенных смесей. Общие подходы к качественному анализу смесей. Методология обратного поиска. Алгоритмы анализа смесей с применением вероятностных критериев.

Перечень основной литературы

1. Вершинин В.И., Дерендяев Б.Г., Лебедев К.С. Компьютерная идентификация органических соединений. – М.: "ИКЦ "Академкнига" , 2002, 197 с.
2. F.K. Brown (1998). «Chapter 35. Chemoinformatics: What is it and How does it Impact Drug Discovery». *Annual Reports in Med. Chem.* 33: 375.
3. Маджидов Т.И., Баскин И.И., Антипин И.С., Варнек А.А. Введение в хемоинформатику. Компьютерное представление химических структур: учебное пособие, Казань: Казанский университет, 2013, 174 с.

Перечень дополнительной литературы

1. М.Л. Придатченко, И.А. Тарасова, К.Масселон, А.В. Горшков, М.В. Горшков. Единый подход к созданию универсальных баз данных точных масс и времён удерживания пептидных маркеров белков на основе модели критической хроматографии биомакромолекул // ТРУДЫ МФТИ, 2009, Том 1, №1. С.94-103.
2. Н. А. Ключев, Е. С. Бродский. Современные методы масс-спектрометрического анализа органических соединений // Рос. хим. ж., 2002, т. 46, № 4, С.57-64.
3. Б. Г. Дерендяев, В. Н. Пиоттух-Пелецкий, К. С. Чмутина, С. А. Нехорошев. Анализ органических веществ с использованием базы данных "масс-спектр – фрагментный состав соединения // Химия в интересах устойчивого развития. Т. 9, (2001) с. 405–416.
4. Schueler-Furman O., Wang C., Bradley P., Misura K., Baker D. (2005). Progress in Modeling of Protein Structures and Interactions. *Science* 310, 638–642.