



**КОНСПЕКТ**  
**за конкурсен изпит за докторантура по**  
**ТЕОРЕТИЧНА ХИМИЯ**  
**МОДУЛ „ХИМИЧНА ИНФОРМАТИКА“**

1. ПРЕДСТАВЯНЕ НА СТРУКТУРНА ИНФОРМАЦИЯ I. Топологични представяния. Матрица на съседство, матрица на връзките и матрица на топологичните разстояния. Таблица на свързаност – основна форма и разширена форма с „излишъци“.
2. ПРЕДСТАВЯНЕ НА СТРУКТУРНА ИНФОРМАЦИЯ II. Линейни нотации SMILES, SMARTS и SMIRKS – представяне на химични структури, химични шаблони за структурно търсене и химични реакции. Линейна нотация InChI. Файлов формат MOL/SDF.
3. ПРЕДСТАВЯНЕ НА СТРУКТУРНА ИНФОРМАЦИЯ III. Геометрично (3D) структурно представяне. Декартови координати. Вътрешни координати. Z-матрица. Молекулни повърхности. Повърхности на Ван дер Ваалс и Конъли.
4. ПРЕДСТАВЯНЕ НА СТРУКТУРНА ИНФОРМАЦИЯ IV. Позиционна изомерия. Стереο изомерия. Тавтомерия.
5. МЕТОД НА МОЛЕКУЛНАТА МЕХАНИКА. Валентно силово поле. Потенциални функции в молекулната механика. Минимизация на енергията и оптимизация на геометрията. Конформери. Конформации. Седлови точки. Методи за търсене на конформери.
6. МОЛЕКУЛНИ ДЕСКРИПТОРИ I. Класификация на молекулните дескриптори, характеристики и свойства. Конституционни дескриптори. Топологични дескриптори. Топологични индекси.
7. МОЛЕКУЛНИ ДЕСКРИПТОРИ II. Геометрични дескриптори. Автокорелационни дескриптори. Дескриптори базирани на информационното съдържание.
8. ХИМИЧНИ БАЗИ ДАННИ. Търсене на структурна информация и фактологични данни. Търсене по идентичност. Подструктурно търсене. Търсене по подобие.
9. СТАТИСТИЧЕСКО МОДЕЛИРАНЕ I. Многопроменлива линейна регресия. Статистическа оценка на параметрите на регресията. Методи за валидиране на модели. Статистически характеристики за валидиране на модел.
10. СТАТИСТИЧЕСКО МОДЕЛИРАНЕ II. Метод на най-близките k съседа (kNN). Метод на центроидите. Линеен дискриминантен анализ. Моделиране чрез дърво на решенията. Изкуствени невронни мрежи.

### Литература

1. J. Gasteiger & T. Engel Ed., Chemoinformatics: Basic concepts and methods, WILEY-VCH, 2018.
2. J. Gasteiger & T. Engel Ed., Chemoinformatics: a textbook, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, 2003.
3. J. Gasteiger Ed., Handbook of Chemoinformatics: From Data To Knowledge Volumes 1, 2, 3 and 4, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co., 2003.
4. R. Todeschini and V. Consonni, Handbook of Molecular Descriptors; WILEY-VCH Verlag GmbH & Co., 2000
5. D. Massart, B. Vandeginste, S. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman. Chemometrics: a textbook. Elsevier, 1988.

6. Andrew R. Leach, V.J. Gillet, An Introduction to Chemoinformatics, Springer, 2007.
7. R.Todeschini, V.Consonni, Molecular Descriptors for Chemoinformatics, Volumes I&II, Wiley-VCH, 2010.
8. K.Varmuza, P.Filzmoser, Introduction to Multivariate Statistical Analysis in Chemometrics, CRC Press Taylor & Francis Group, 2008

Изготвил: .....

(доц. д-р Н. Кочев)

Ръководител катедра АХКХ: .....

(доц. д-р К. Симитчиев)