# Cvičení 2

## Pracovní list

1. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „similar\_molecules.smi“ a pro kofein a jednu další molekulu doplňte následující tabulku:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Vlastnost** | **Hodnota** | **Zdroj** |
| Sumární vzorec |  |  |
| Celkový počet atomů |  |  |
| Molekulová hmotnost |  |  |
| Teplota tání |  |  |
| Teplota varu |  |  |
| logP |  |  |
| pKa (ve vodě o teplotě 20°C ± 5°C) |  |  |
| Rozpustnost ve vodě |  |  |
| Počet donoru vodíkové vazby |  |  |
| Počet akceptoru vodíkové vazby |  |  |
| CAS number |  |  |
| INCHIKey |  |  |

1. V PubChemu hledejte 20 nejpodobnějších molekul k molekule kofeinu.
2. V CheMBLu najděte aktivity pro cílový protein cyklooxygenaza COX-2.
3. Nakreslete strukturní vzorce k těmto SMILES notacím. Porovnejte s výsledkem z nějakého nástroje na webu. (google: „depict smiles“)
   1. NCCC(N)CC(N)CC(N)C(=O)O
   2. NCc1c(N)cc(N)c(N)c1C(=O)O
   3. COCc1c2c(nc(OC)[nH]2)nc(CC)n1
   4. Cn1cnc2c1c(=O)n(c(=O)n2C)C
4. Ve studijních materiálech naleznete strukturu kofeinu stanovenou za pomoci rentgenové krystalografie „caffeine.mol“. Použijte utilitu OpenBabelu obfit, a zjistěte jak se tato struktura liší (hodnota RMSD) od struktury uložené v těchto databázích:
   1. PubChem
   2. NCI
   3. Zinc

A jak se liší od struktur vygenerovaných pomocí (jako vstup použijte smiles):

* 1. Coriny
  2. OpenBabelu?

1. Seřaďte molekuly podle odlišnosti struktur (od nejméně odlišné po nejvíce odlišnou).
2. Ve studijních materiálech naleznete molekuly uložené ve formátu SMILES „molecules.smi“. Za použití OpenBabelu spočítejte sady fingerprintů FP2 (defaultní sada fingeprintů) a Tanimotův podobnostní koeficient vůči kofeinu.

|  |  |
| --- | --- |
|  | Hodnota Tanimotova podobnostní koeficientu ve srovnání s kofeinem |
| BAS 07401417 |  |
| adenin |  |
| nikotin |  |
| theobromin |  |
| vitamín A |  |