

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		

2. V PubChemu hledejte 20 nejpodobnějších molekul k molekule kofeinu.

3. V ChEMBLu najděte aktivity pro cílový protein cyklooxygenaza COX-2.

4. Nakreslete strukturní vzorce k těmto SMILES notacím. Porovnejte s výsledkem z nějakého nástroje na webu. (google: „depict smiles“)
 - a. NCCC(N)CC(N)CC(N)C(=O)O
 - b. NCc1c(N)cc(N)c(N)c1C(=O)O
 - c. COc1c2c(nc(OC)[nH]2)nc(CC)n1
 - d. Cn1cnc2c1c(=O)n(c(=O)n2C)C

Pokročilá chemoinformatika - seminář

5. 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:
 - a. PubChem
 - b. NCI
 - c. ZincA jak se liší od struktur vygenerovaných pomocí (jako vstup použijte smiles):
 - d. Coriny
 - e. OpenBabelu?
6. Seřadte molekuly podle odlišnosti struktur (od nejméně odlišné po nejvíce odlišnou).
7. Ve studijních materiálech naleznete molekuly uložené ve formátu SMILES „molecules.smi“. Za použití OpenBabelu spočítejte sady fingerprintů FP2 (defaultní sada fingerprintů) a Tanimotův podobnostní koeficient vůči kofeinu.

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