

1. Vypočítejte pomocí ACC2, default mód, do následující tabulky náboje na atomech O a H (fenolová skupina):

Tabulka s náboji:

Název molekuly	pKa	Náboj na atomu	
		O	H
3-ethoxyphenol	9,65		
2,4,6-trinitrofenol	0,42		
2,3-dinitrofenol	4,68		
3-hydroxybenzaldehyd	8,98		
5-methyl-2-nitrophenol	7,41		
2-hydroxybenzamide	8,37		
2,4,6-trimethylfenol	10,88		

a) Vytvořte si v excelu graf deskriptorového prostoru, konkrétně: Na osu x dejte náboj na O, na osu Y náboj na H. Zobrazte si graf, který ukazuje body X a Y.

Poznámka: Pokud s Excelem neumíte, postupujte takto: Zkopírujte si do Excelu výše uvedenou tabulku. Označte hodnoty nábojů. Dejte "Vložit" (Insert) a vyberte "Grafy" (Charts) a vyberte graf X,Y.

b) Vypočítejte Euklidovskou vzdálenost pro:

- 2,4,6-trinitrofenol a 3-ethoxyphenol:
- 2,4,6-trinitrofenol 2-hydroxybenzamide:

b) Která(é) dvojice mají Euklidovskou vzdálenost nejvyšší?

c) Která(é) dvojice mají Euklidovskou vzdálenost nejnižší?

d) Která Euklidovská vzdálenost vám "řekla více"? Binární nebo s reálnými čísly?