1. Z minulé sady úkolů převezmeme obsah následující tabulky:

Tabulka 1 s fingerprinty:

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Tabulka 1 |  |  |  | -OH | -Cl | -NO2 | -CH3 | -COOH |
| 2,4,6-trinitrofenol | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 2,3-dinitrofenol | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 3-hydroxybenzaldehyd | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2,4,6-trimethylfenol | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 |

1. Vypočítejte Tanimotův koeficient pro dvojice:
	* 2,4,6-trinitrofenol a 2,3-dinitrofenol: 1
	* 2,4,6-trinitrofenol a 3-hydroxybenzaldehyd: 2 / 3
2. Doplňte do tabulky hodnoty Tanimotova koeficientu:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Tabulka 2 | 2,4,6-trinitrofenol | 2,3-dinitrofenol | 3-hydroxy-benzaldehyd | 2,4,6-trimethylfenol |
| 2,4,6-trinitrofenol | 1 | 1 | 2/3 | ½ |
| 2,3-dinitrofenol |  | 1 | 2/3 | ½ |
| 3-hydroxybenzaldehyd |  |  | 1 | 2/3 |
| 2,4,6-trimethylfenol |  |  |  | 1 |

1. Která(é) dvojice mají Tanimotův koeficient nejnižší a nejvyšší?

Viz ta tabulka :-)

1. Vypočítejte Cosinův koeficient pro dvojice:
	* 2,4,6-trimethylfenol a 2,3-dinitrofenol: 3/3
	* 2,4,6-trimethylfenol a 3-hydroxybenzaldehyd: 2 / $\sqrt{6}$
2. Vypočítejte (binární) Euklidovskou vzdálenost pro dvojice:
	* 2,4,6-trinitrofenol a 2,3-dinitrofenol: 0
	* 2,4,6-trinitrofenol a 3-hydroxybenzaldehyd: 1
3. Pro fingerprinty z Tabulky 1 udělejte konsensuální fingerprinty (použijte operaci OR):

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Tabulka 1 |  | -NO2 | -OH-COOH | -Cl-CH3 |
| 2,4,6-trinitrofenol | 1 | 1 | 1 | 0 |
| 2,3-dinitrofenol | 1 | 1 | 1 | 0 |
| 3-hydroxybenzaldehyd | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 2,4,6-trimethylfenol | 1 | 0 | 1 | 1 |

1. Z minulé sady úkolů si vykopírujte do následující tabulky náboje na atomech O a H:

Tabulka s náboji:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Tabulka 3 | Náboj na O (z OH skupiny) | Náboj na H (z OH skupiny) |
| 2,4,6-trinitrofenol | -0,5690 | 0,5670 |
| 2,3-dinitrofenol | -0,6110 | 0,4640 |
| 3-hydroxybenzaldehyd | -0,6910 | 0,4060 |
| 2,4,6-trimethylfenol | -0,7140 | 0,3670 |

1. 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.

1. Vypočítejte Euklidovskou vzdálenost pro:
* 2,4,6-trinitrofenol a 2,3-dinitrofenol: $D\_{AB}=\sqrt{(x\_{A}-x\_{B})^{2}+(y\_{A}-y\_{B})^{2}}$

$$D\_{AB}=0,111$$

* + 2,4,6-trinitrofenol a 3-hydroxybenzaldehyd: $D\_{AB}=\sqrt{(x\_{A}-x\_{B})^{2}+(y\_{A}-y\_{B})^{2}}$

$$D\_{AB}=0,202$$

1. Která(é) dvojice mají Euklidovskou vzdálenost nejvyšší?

2,4,6-trinitrofenol a 2,4,6-trimethylfenol

1. Která(é) dvojice mají Euklidovskou vzdálenost nejnižší?

3-hydroxybenzaldehyd a 2,4,6-trimethylfenol