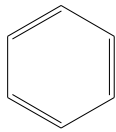
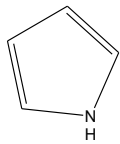
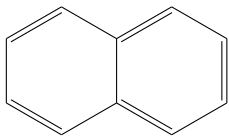


1. Z minulé sady úkolů převezmeme obsah následující tabulky:

Tabulka 1 s fingerprinty:

Tabulka 1				-OH	-Cl	-NO <sub>2</sub>	-CH <sub>3</sub>	-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

a) Vypočítejte Tanimotův koeficient pro dvojice:

- 2,4,6-trinitrofenol a 2,3-dinitrofenol: 1
- 2,4,6-trinitrofenol a 3-hydroxybenzaldehyd: 2 / 3

b) Doplňte do tabulky hodnoty Tanimotova koeficientu:

Tabulka 2	2,4,6-trinitrofenol	2,3-dinitrofenol	3-hydroxybenzaldehyd	2,4,6-trimethylfenol
2,4,6-trinitrofenol	1	1	2/3	1/2
2,3-dinitrofenol		1	2/3	1/2
3-hydroxybenzaldehyd			1	2/3
2,4,6-trimethylfenol				1

c) Která(é) dvojice mají Tanimotův koeficient **nejnižší** a **nejvyšší**?

Viz ta tabulka :-)

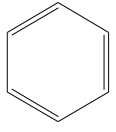
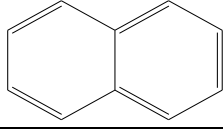
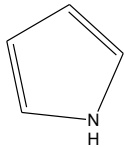
d) Vypočítejte Cosinův koeficient pro dvojice:

- 2,4,6-trimethylfenol a 2,3-dinitrofenol: 3/3
- 2,4,6-trimethylfenol a 3-hydroxybenzaldehyd:  $2 / \sqrt{6}$
- 

e) Vypočítejte (binární) Euklidovskou vzdálenost pro dvojice:

- 2,4,6-trinitrofenol a 2,3-dinitrofenol: 0
- 2,4,6-trinitrofenol a 3-hydroxybenzaldehyd: 1

2. Pro fingerprinty z Tabulky 1 udělejte konsenzuální fingerprinty (použijte operaci OR):

Tabulka 1	 	 -NO <sub>2</sub>	-OH -COOH	-Cl -CH <sub>3</sub>
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

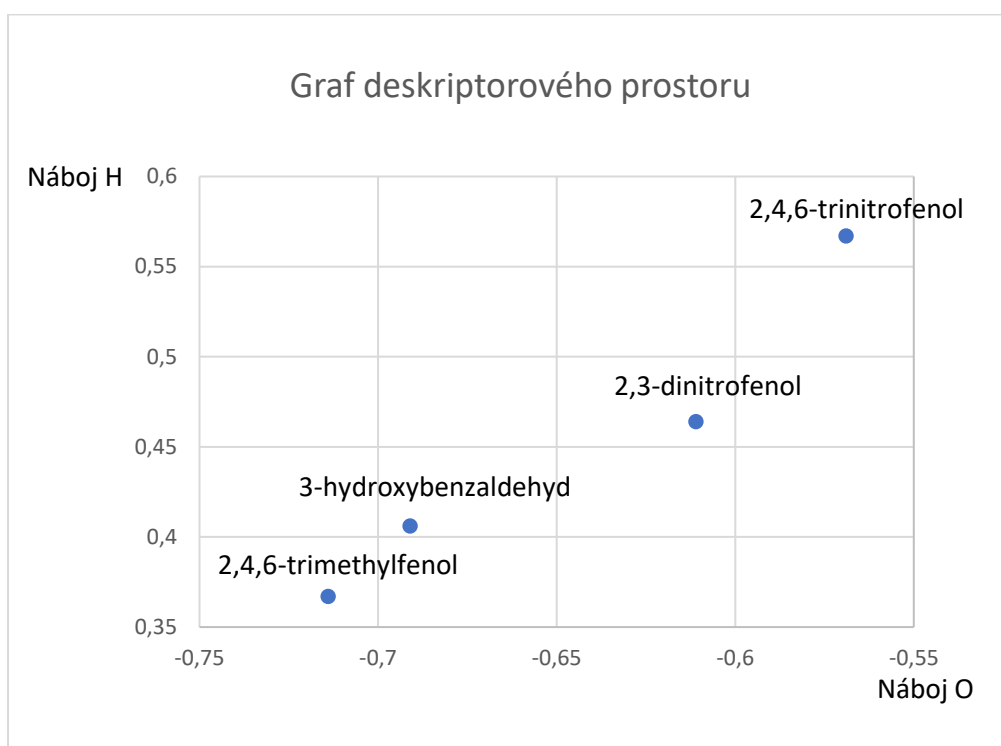
3. Z minulé sady úkolů si vykopírujte do následující tabulky náboje na atomech O a H:

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

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 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:  $D_{AB} = \sqrt{(x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2}$   
 $D_{AB} = 0,202$

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

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

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

3-hydroxybenzaldehyd a 2,4,6-trimethylfenol