

1D deskriptory

1. Doplňte Tabulku 1:

Tabulka 1	Anglický název	Pubchem ID	Sumární vzorec	Molekulová hmotnost	Disociační konstanta (pKa)
2,4,6-trinitrofenol	2,4,6-Trinitrophenol	6954	C ₆ H ₃ N ₃ O ₇	229.1	0.42
2,3-dinitrofenol	2,3-Dinitrophenol	6191	C ₆ H ₄ N ₂ O ₅	184.11	4.86
3-hydroxybenzaldehyd	3-Hydroxybenzaldehyde	101	C ₇ H ₆ O ₂	122.12	8.98
2,4,6-trimethylfenol	2,4,6-Trimethylphenol	10698	C ₉ H ₁₂ O	136.19	10.9

Poznámka: Pokud něco nenajdete v PubChemu, hledejte jinde na Internetu.

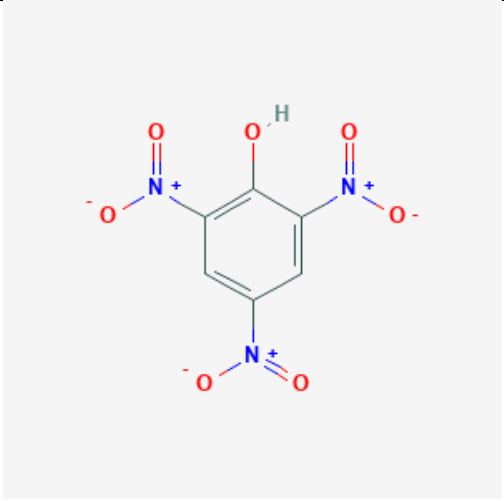
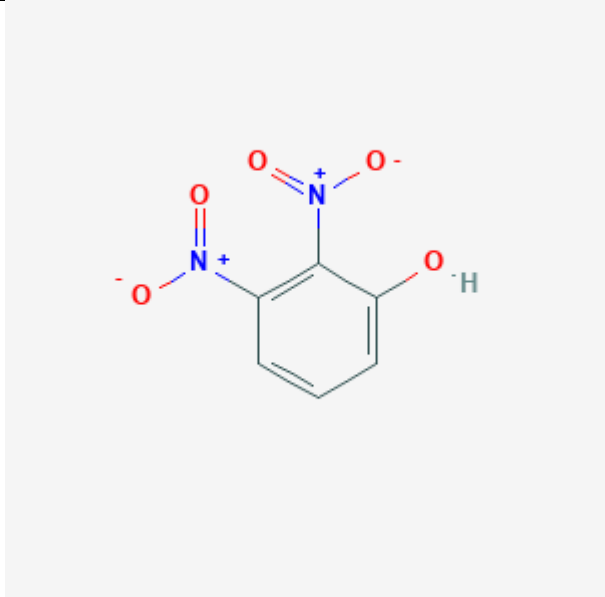
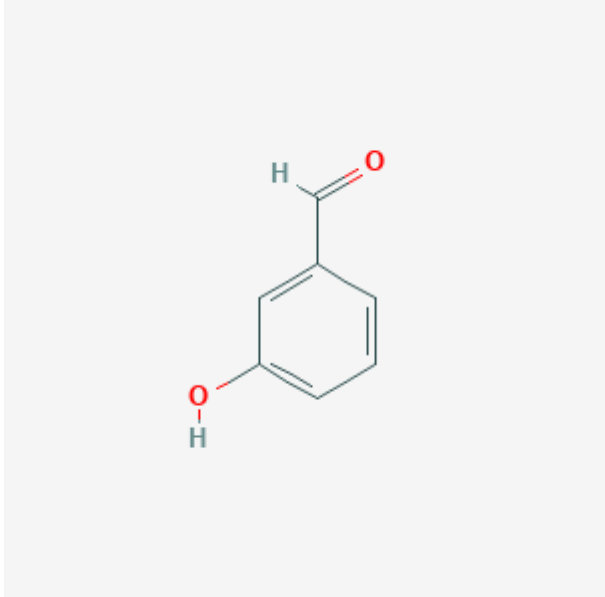
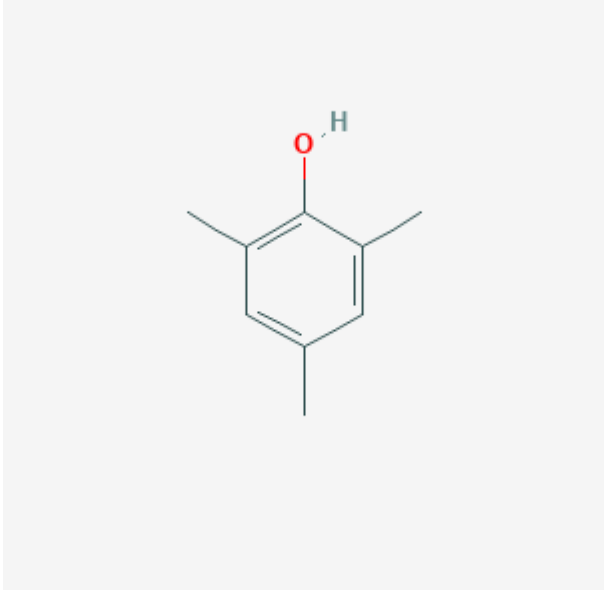
2. Jaké další 1D deskriptory jste schopni v PubChemu najít? Napište je sem:

Jaké další najdete v DrugBank a LigandExpo? Napište je sem:

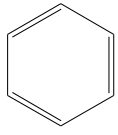
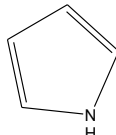
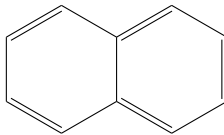
2D deskriptory

3. Doplňte Tabulku 2 s 2D strukturami:

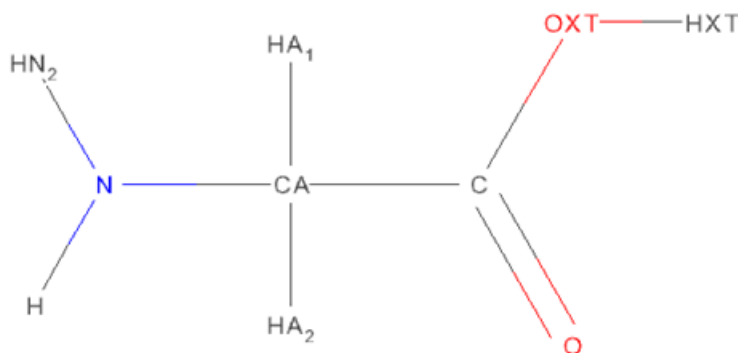
Tabulka 2:

2,4,6-trinitrofenol	2,3-dinitrofenol
	
3-hydroxybenzaldehyd	2,4,6-trimethylfenol
	

4. Doplňte Tabulku 3 s fingerprinty:

Tabulka 3				-OH	-Cl	-NO ₂	-CH ₃	-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	1	1	0

5. Doplňte Tabulku 4, pro každou dvojici atomů v molekule glycinu (viz obrázek) napište nejmenší počet vazeb, který je od sebe dělí.



Tabulka 4	HN2	H	N	HA1	CA	HA2	C	O	OXT	HXT
HN2	0	2	1	3	2	3	3	4	4	5
H		0	1	3	2	3	3	4	4	5
N			0	2	1	2	2	3	3	4
HA1				0	1	2	2	3	3	4
CA					0	1	1	2	2	3
HA2						0	2	3	3	4
C							0	1	1	2
O								0	2	3
OXT									0	1
HXT										0

6. Spočítejte Wienerův index pro molekulu glycinu. Použijte vzorec:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N D_{ij}$$

kde N je počet atomů a D_{ij} je vzdálenost mezi atomy i a j.

3D deskriptory

7. Pomocí MolView (molview.org) si zobrazte postupně molekuly z Tabulky 1. (Nejlépe se dohledají pomocí anglického názvu.) Doplňte v Tabulce 5 sloupec „Vzdálenost mezi atomy O a H“ – změřte si tuto vzdálenost pomocí (v MolView je to záložka Jmol a příkaz „Distance“, musíte kliknout na dvojici atomů, kde vzdálenost měříte).

Tabulka 5	Vzdálenost mezi atomy O a H	Náboj na O (z OH skupiny)	Náboj na H (z OH skupiny)
2,4,6-trinitrofenol	0.097 nm		
2,3-dinitrofenol	0.97Å		
3-hydroxybenzaldehyd	0.097		

2,4,6-trimethylfenol	0.097		
----------------------	-------	--	--

8. V jaké jednotce jsou naměřené vzdálenosti?

9. Je nějaký vztah mezi délkou vazby O a H a hodnotou pKa? Pokud ano, jaký?

10. Stáhněte si z PubChemu 3D struktury molekul, jejichž seznam je v Tabulce 1. Pomocí nástroje Atomic Charge calculator II (<https://acc2.ncbr.muni.cz/>) si vypočítejte náboje na nich a vyplňte je do tabulky.

11. Je nějaký vztah mezi náboji na O a H a hodnotou pKa? Pokud ano, jaký?