

1. Najděte si v Protein Data Bank molekulu hemoglobinu, podívejte se na její zápis v PDB a mmCIF formátu a porovnejte je.
2. Zjistěte, v kterých z následujících databází najdete SMILES, InChI a InChIKey?
 - Pubchem
 - LigandExpo
 - DrugBank
 - PDB
3. Najděte SMILES pro phenol v těch, z výše uvedených databází, kde SMILES mají a zkopírujte si ho sem. Zjistěte, jestli jsou SMILES řetězce stejné případně prozkoumejte, jak moc se liší.
4. Najděte SMILES pro morfin v těch, z výše uvedených databází, kde SMILES mají a zkopírujte si ho sem. Zjistěte, jestli jsou SMILES řetězce stejné případně prozkoumejte, jak moc se liší.
5. Nakreslete molekulu s tímto SMILES řetězcem: Cc1ccc(O)cc1
6. Najděte molekulu se SMILES řetězcem Cc1ccc(O)cc1 v databázi Pubchem.
7. Najděte InChI a InChIKey pro morfin v těch, z výše uvedených databází, kde je mají a zkopírujte si je sem. Zjistěte, jestli jsou tyto řetězce stejné.
8. Najděte molekulu s InChIKey: InChI=1S/C8H11NO3/c9-4-8(12)5-1-2-6(10)7(11)3-5/h1-3,8,10-12H,4,9H2/p+1/t8-/m0/s1 v databázi LigandExpo.