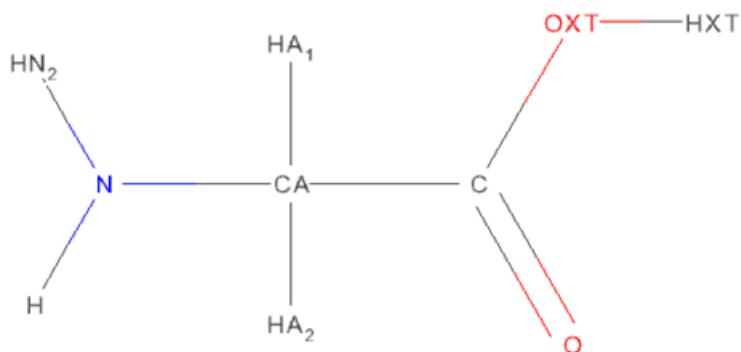




5. Doplňte Tabulku 4, pro každou dvojici atomů v molekule glycinu (viz obrázek) napište nejmenší počet vazeb, který je od sebe dělí.



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

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	Disociační konstanta (pKa)	Vzdálenost mezi atomy O a H	Náboj na O (z OH skupiny)	Náboj na H (z OH skupiny)
2,4,6-trinitrofenol				
2,3-dinitrofenol				
3-hydroxybenzaldehyd				
2,4,6-trimethylfenol				

8. V jaké jednotce jsou naměřené vzdálenosti?  
 9. Do prvního sloupce tabulky si z Tabulky 1 nakopírujte hodnoty pKa. 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?