

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 |

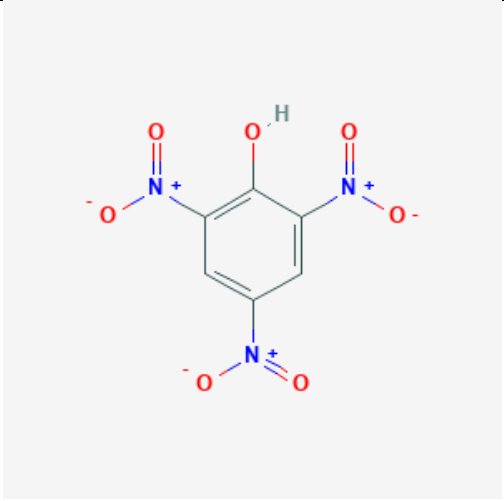
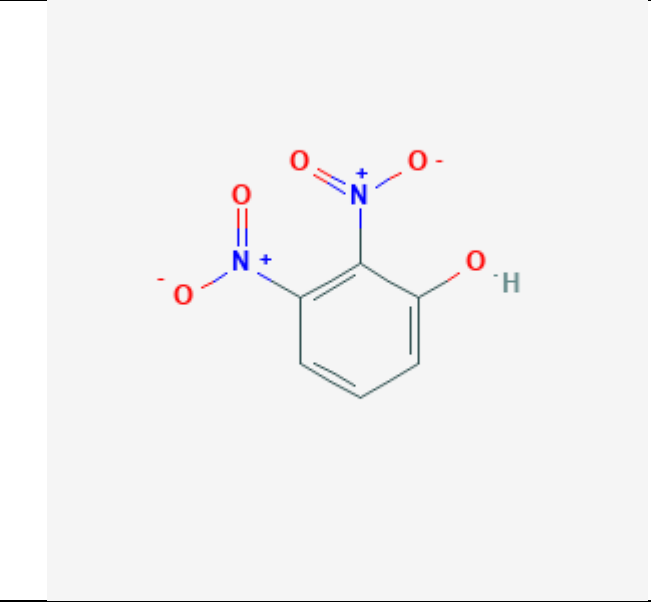
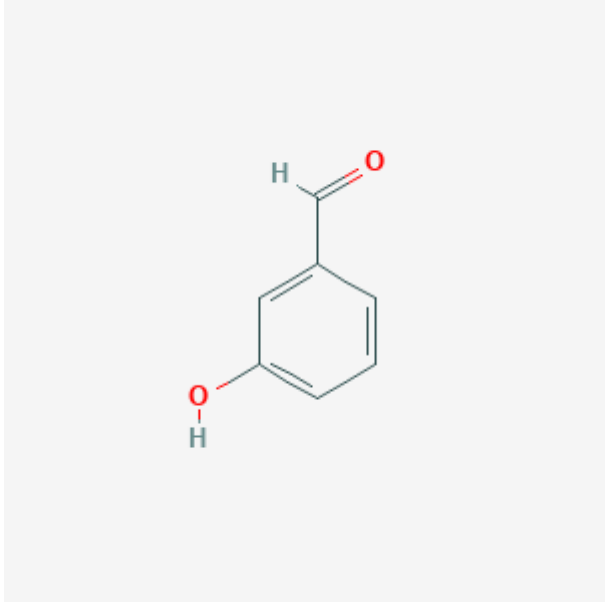
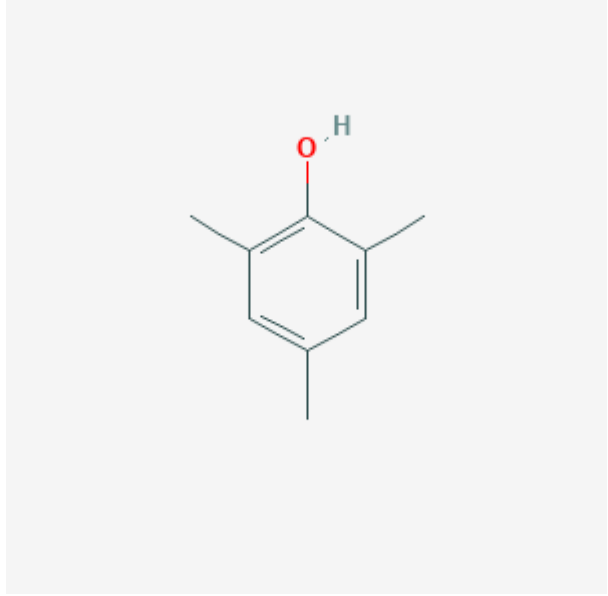
Poznámka: Pokud něco nenajdete v PubChemu, hledejte jinde na Internetu.

2. Jaké další 1D deskriptory jste schopni v PubChemu najít? Napište je sem: molekulární hmotnost, sumární vzorec, ...
Jaké další najdete v DrugBank a LigandExpo? Napište je sem: toxicita, bod tání, bod varu, ...

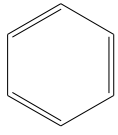
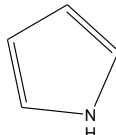
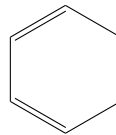
2D deskriptory

3. Doplňte Tabulku 2 s 2D strukturami:

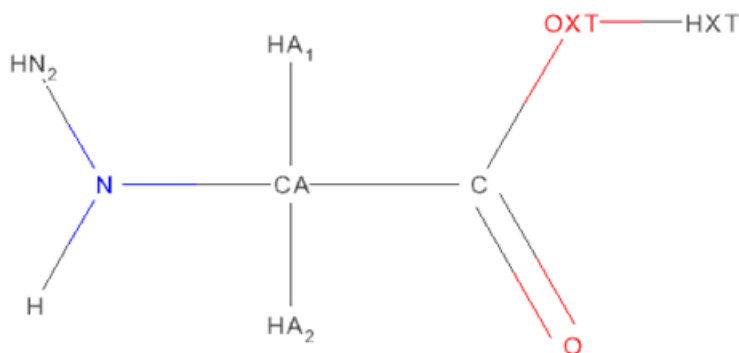
Tabulka 2:

| 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.

115

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? nm

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?