1. Vyhledejte v databázi PubChem molekulu, která je stejná jako tato:



Poznámka: Doporučuji najít si podobnou strukturu (je to sterol), okopírovat si její SMILES do funkce „draw structure“ a tam si ho upravit tak, aby vypadal stejně.

Uveďte ID této molekuly: 14205971

Uveďte SMILES této molekuly: CC12CCCC1C3CCC4=CC=CC=C4C3CC2

1. Najděte v PubChemu všechny molekuly, které jsou této molekule podobné
	1. Kolik jich zde je?
	2. Jaké je CID molekuly, které je nejvíce podobná?
	3. Vyfiltrujte molekuly, které mají počet akceptorů vodíkové vazby 2-3. Kolik jich je?
2. Najděte v PubChemu všechny molekuly, které obsahují výše uvedenou molekulu.
	1. Kolik jich zde je?
	2. Vyfiltrujte si molekuly, které mají nejnižší složitost. Kolik jich je?
3. Najděte v LigandExpu molekuly, které obsahují cyklopentanový cyklus. Kolik jich je? (Hledejte názvy obsahující “cyclopent“.)
4. Najděte v LigandExpu molekuly, které obsahují manózu (má třípísmennou zkratku MAN).
5. Najděte v DrugBank molekuly, které obsahují výše uvedenou (obrázek 1) podstrukturu. Poznámka: Použijte „Search“ a „Chemical structure“.
	1. Kolik jich zde je?
	2. Jak se jmenuje první z nich?