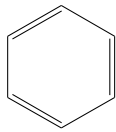
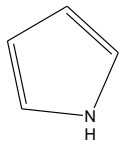
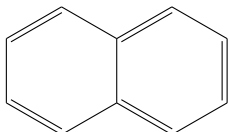


1. Z minulé sady úkolů převezmeme obsah následující tabulky:

Tabulka 1 s fingerprinty:

| Tabulka 1            |  |  |  | -OH | -Cl | -NO <sub>2</sub> | -CH <sub>3</sub> | -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   | 0                | 1                | 0     |

a) Vypočítejte Tanimotův koeficient pro dvojice:

- 2,4,6-trinitrofenol a 2,3-dinitrofenol: 1
- 2,4,6-trinitrofenol a 3-hydroxybenzaldehyd: 2 / 3

b) Doplňte do tabulky hodnoty Tanimotova koeficientu:

| Tabulka 2            | 2,4,6-trinitrofenol | 2,3-dinitrofenol | 3-hydroxybenzaldehyd | 2,4,6-trimethylfenol |
|----------------------|---------------------|------------------|----------------------|----------------------|
| 2,4,6-trinitrofenol  | 1                   | 1                | 2/3                  | 1/2                  |
| 2,3-dinitrofenol     |                     | 1                | 2/3                  | 1/2                  |
| 3-hydroxybenzaldehyd |                     |                  | 1                    | 2/3                  |
| 2,4,6-trimethylfenol |                     |                  |                      | 1                    |

c) Která(é) dvojice mají Tanimotův koeficient **nejnižší** a **nejvyšší**?

Viz ta tabulka :-)

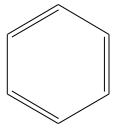
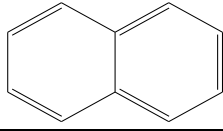
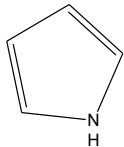
d) Vypočítejte Cosinův koeficient pro dvojice:

- 2,4,6-trimethylfenol a 2,3-dinitrofenol: 3/3
- 2,4,6-trimethylfenol a 3-hydroxybenzaldehyd: 2 /  $\sqrt{6}$
- 

e) Vypočítejte (binární) Euklidovskou vzdálenost pro dvojice:

- 2,4,6-trinitrofenol a 2,3-dinitrofenol: 0
- 2,4,6-trinitrofenol a 3-hydroxybenzaldehyd: 1

2. Pro fingerprinty z Tabulky 1 udělejte konsenzuální fingerprinty (použijte operaci OR):

| Tabulka 1            | <br> | <br>-NO <sub>2</sub> | -OH<br>-COOH | -Cl<br>-CH <sub>3</sub> |
|----------------------|--|---|--------------|-------------------------|
| 2,4,6-trinitrofenol  | 1  | 1   | 1            | 0                       |
| 2,3-dinitrofenol     | 1  | 1   | 1            | 0                       |
| 3-hydroxybenzaldehyd | 1  | 0   | 1            | 0                       |
| 2,4,6-trimethylfenol | 1  | 0   | 1            | 1                       |

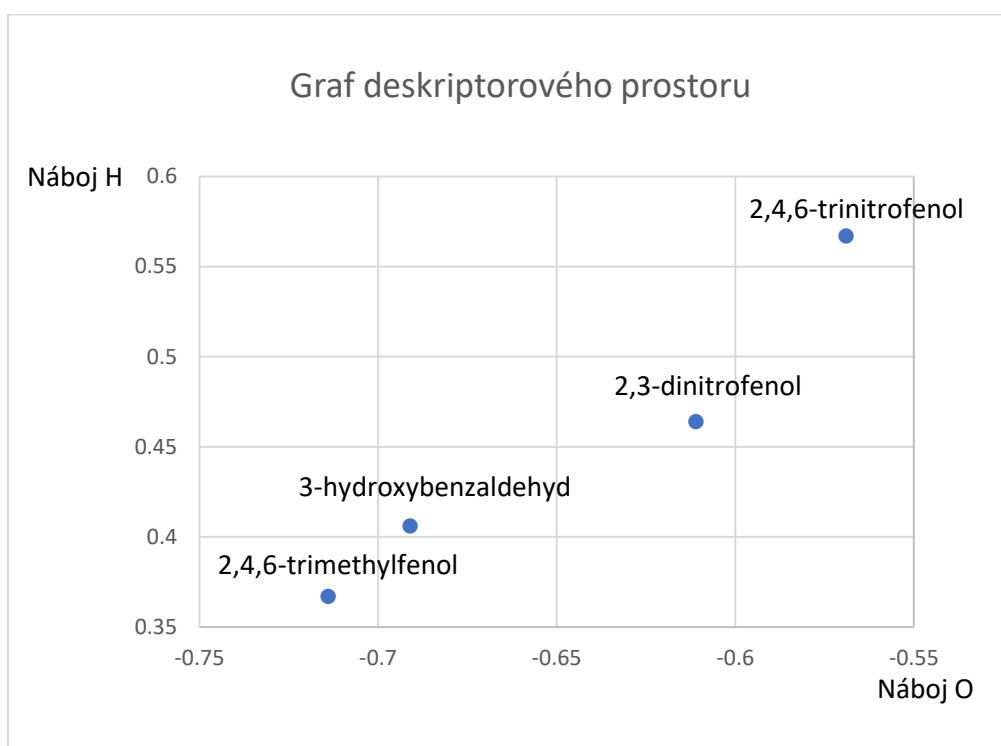
3. Z minulé sady úkolů si vykopírujte do následující tabulky náboje na atomech O a H:

Tabulka s náboji:

| Tabulka 3            | Náboj na O (z OH skupiny) | Náboj na H (z OH skupiny) |
|----------------------|---------------------------|---------------------------|
| 2,4,6-trinitrofenol  | -0,5690                   | 0,5670                    |
| 2,3-dinitrofenol     | -0,6110                   | 0,4640                    |
| 3-hydroxybenzaldehyd | -0,6910                   | 0,4060                    |
| 2,4,6-trimethylfenol | -0,7140                   | 0,3670                    |

a) Vytvořte si v excelu graf deskriptorového prostoru, konkrétně: Na osu x dejte náboj na O, na osu Y náboj na H. Zobrazte si graf, který ukazuje body X a Y.

Poznámka: Pokud s Excelem neumíte, postupujte takto: Zkopírujte si do Excelu výše uvedenou tabulku. Označte hodnoty nábojů. Dejte "Vložit" (Insert) a vyberte "Grafy" (Charts) a vyberte graf X,Y.



b) Vypočítejte Euklidovskou vzdálenost pro:

- 2,4,6-trinitrofenol a 2,3-dinitrofenol:  $D_{AB} = \sqrt{(x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2}$

$$D_{AB} = 0,111$$

- 2,4,6-trinitrofenol a 3-hydroxybenzaldehyd:  $D_{AB} = \sqrt{(x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2}$   
 $D_{AB} = 0,202$

b) Která(é) dvojice mají Euklidovskou vzdálenost nejvyšší?

2,4,6-trinitrofenol a 2,4,6-trimethylfenol

c) Která(é) dvojice mají Euklidovskou vzdálenost nejnižší?

3-hydroxybenzaldehyd a 2,4,6-trimethylfenol