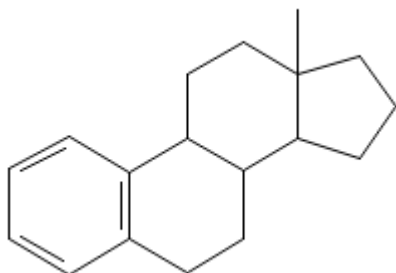


1. Vyhledejte v databázi PubChem molekulu, která je stejná jako tato:



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

2. Najděte v PubChemu všechny molekuly, které jsou této molekule podobné
  - a. Kolik jich zde je? 2,951
  - b. Jaké je CID molekuly, které je nejvíce podobná? 6432211
  - c. Vyfiltrujte molekuly, které mají počet akceptorů vodíkové vazby 2-3. Kolik jich je? 16
3. Najděte v PubChemu všechny molekuly, které obsahují výše uvedenou molekulu.
  - a. Kolik jich zde je? 45,066
  - b. Vyfiltrujte si molekuly, které mají nejnižší složitost. Kolik jich je? 10 (complexity 0)
4. Najděte v LigandExpu molekuly, které obsahují cyklopentanový cyklus. Kolik jich je? 876 (Hledejte názvy obsahující „cyclopent“.)
5. Najděte v LigandExpu molekuly, které obsahují manózu (má třípísmennou zkratku MAN). 319
6. Najděte v DrugBank molekuly, které obsahují výše uvedenou (obrázek 1) podstrukturu.  
Poznámka: Použijte „Search“ a „Chemical structure“.
  - a. Kolik jich zde je? 34
  - b. Jak se jmenuje první z nich? Estrone