1. Vypočítejte pomocí ACC2, default mód, do následující tabulky náboje na atomech O a H (fenolová skupina):

Tabulka s náboji:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Název molekuly** | **pKa** | **Náboj na atomu** |
| **O** | **H** |
| 3-ethoxyphenol | 9,65 |  |  |
| 2,4,6-trinitrofenol | 0,42 |  |  |
| 2,3-dinitrofenol | 4,68 |  |  |
| 3-hydroxybenzaldehyd | 8,98 |  |  |
| 5-methyl-2-nitrophenol | 7,41 |  |  |
| 2-hydroxybenzamide | 8,37 |  |  |
| 2,4,6-trimethylfenol | 10,88 |  |  |

1. 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.

1. Vypočítejte Euklidovskou vzdálenost pro:
	* 2,4,6-trinitrofenol a 3-ethoxyphenol:
	* 2,4,6-trinitrofenol 2-hydroxybenzamide:
2. Která(é) dvojice mají Euklidovskou vzdálenost nejvyšší?
3. Která(é) dvojice mají Euklidovskou vzdálenost nejnižší?
4. Která Euklidovská vzdálenost vám “řekla více”? Binární nebo s reálnými čísly?