

## 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 <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub> | 229.1               | 0.42                       |
| 2,3-dinitrofenol     | 2,3-Dinitrophenol     | 6191       | C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub> | 184.11              | 4.86                       |
| 3-hydroxybenzaldehyd | 3-Hydroxybenzaldehyde | 101        | C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>                | 122.12              | 8.98                       |
| 2,4,6-trimethylfenol | 2,4,6-Trimethylphenol | 10698      | C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O                            | 136.19              | 10.9                       |

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

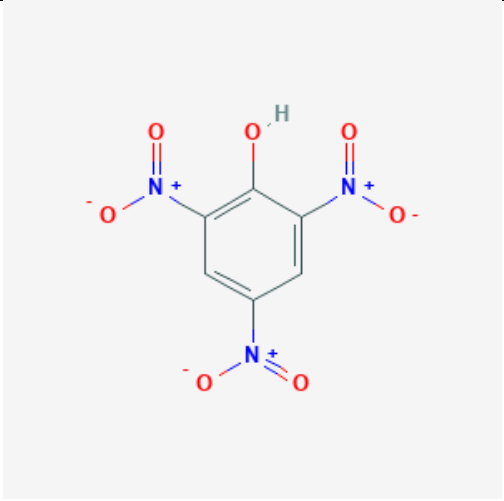
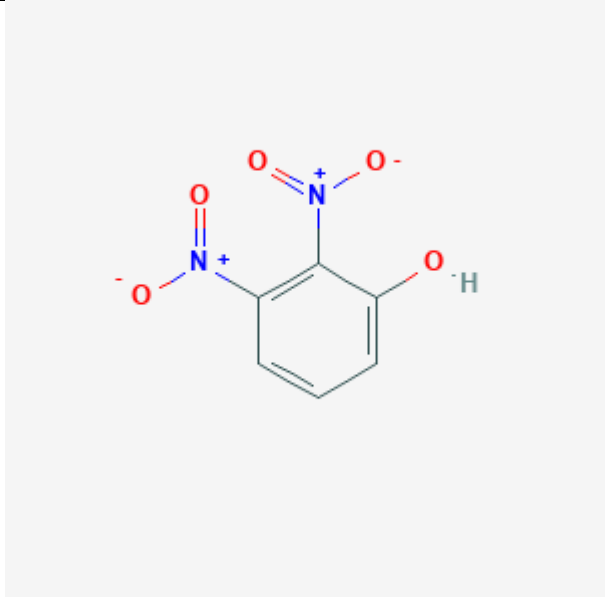
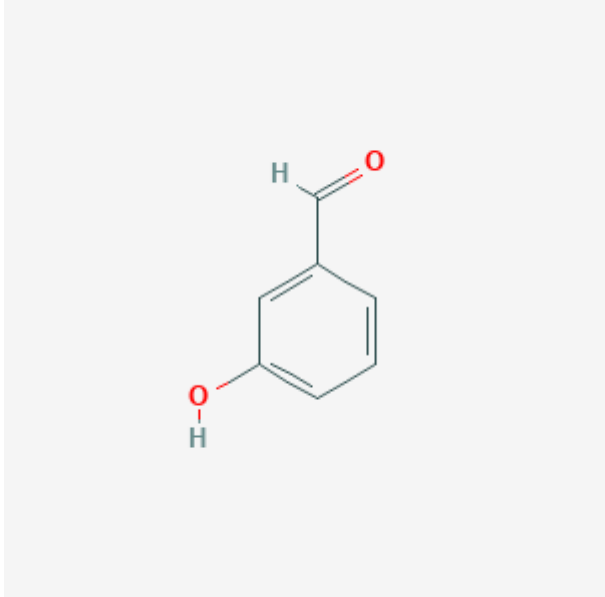
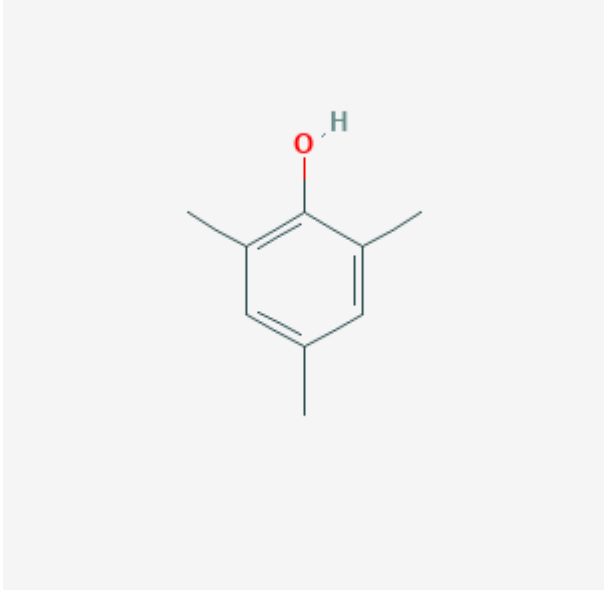
2. Jaké další 1D deskriptory jste schopni v PubChemu najít? Napište je sem:

Jaké další najdete v DrugBank a LigandExpo? Napište je sem:

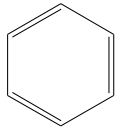
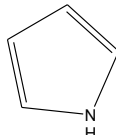
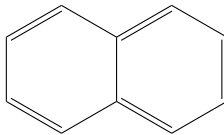
## 2D deskriptory

3. Doplňte Tabulku 2 s 2D strukturami:

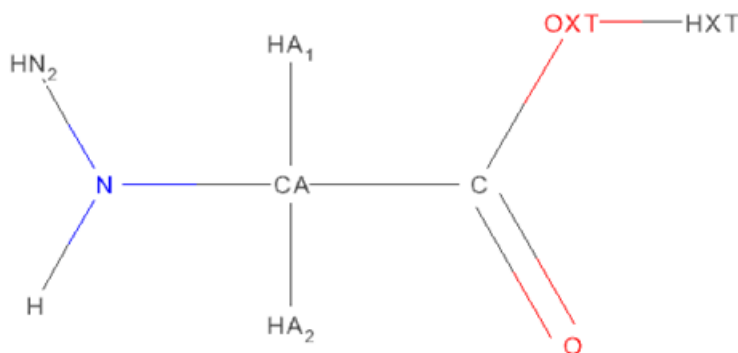
Tabulka 2:

| 2,4,6-trinitrofenol   | 2,3-dinitrofenol   |
|---|--|
|   |   |
| 3-hydroxybenzaldehyd  | 2,4,6-trimethylfenol   |
|  |  |

4. Doplňte Tabulku 3 s fingerprinty:

| Tabulka 3            |  |  |  | -OH | -Cl | -NO <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   | 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?