|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **1. VAJA** | **Filtriranje in priprava kemijskih knjižnic** | | | Datum |
| Ime in priimek | |  | Skupina | |

1. Narišite strukturo vaše učinkovine in jo zapišite z zapisom SMILES.

Struktura:

SMILES zapis:

1. Kakšna je razlika med zapisom SMILES in 3D zapisom molekule?
2. Kakšne so vrednosti posameznih deskriptorjev za vašo učinkovino (drugbank.ca)?

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Molekulska masa | logP | Št. donorjev H-vezi | Št. akceptorjev H-vezi |
|  |  |  |  |

1. Koliko konformacij vaše učinkovine je zgeneriral program omega2?
2. Glede na katera pravila je bil nastavljen filter.txt preden ste ga uredili?
3. Koliko spojin je bilo v začetni knjižnici in koliko jih je prestalo filtriranje (filter.info)?
4. Kakšne so povprečne vrednosti deskriptorjev filtrirane knjižnice?

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Molekulska masa | logP | Št. donorjev H-vezi | Št. akceptorjev H-vezi |
|  |  |  |  |

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **1. VAJA** | **Iskanje spojin v kemijskih knjižnicah na osnovi 2D in 3D podobnosti** | | | Datum |
| Ime in priimek | |  | Skupina | |

1. Kateri nivo podobnosti ste uporabili in koliko zadetkov najde 2D iskanje na osnovi podobnosti? Spadajo vsi zadetki v isto terapevtsko skupino?
2. Predlagajte skelet s katerim bi našli vsaj dva od gornjih zadetkov, če bi uporabili iskanje na osnovi podstrukture.
3. Koliko zadetkov s Tanimotovim indeksom podobnosti za obliko (shape) nad 0.8 najde ROCS?
4. Koliko zadetkov s Tanimotovim indeksom podobnosti za »color« nad 0.8 najde ROCS?
5. Zakaj lahko pri 2D metodah uporabimo knjižnico v SMILES zapisu, pri 3D pa ne?
6. Kako se razlikujejo 2D in 3D metode? Katera se vam zdi boljša na vašem primeru in zakaj?