

Vaje pri predmetu Načrtovanje in sinteza učinkovin
Poročilo o opravljeni vaji

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:

2. Kakšna je razlika med zapisom SMILES in 3D zapisom molekule?
3. Kakšne so vrednosti posameznih deskriptorjev za vašo učinkovino (drugbank.ca)?
Molekulska masa logP Št. donorjev H-vezi Št. akceptorjev H-vezi
4. Koliko konformacij vaše učinkovine je zgeneriral program omega2?
5. Glede na katera pravila je bil nastavljen filter.txt preden ste ga uredili?
6. Koliko spojin je bilo v začetni knjižnici in koliko jih je prestalo filtriranje (filter.info)?
7. Kakšne so povprečne vrednosti deskriptorjev filtrirane knjižnice?
Molekulska masa logP Št. donorjev H-vezi Št. akceptorjev H-vezi

Vaje pri predmetu Načrtovanje in sinteza učinkovin
Poročilo o opravljeni vaji

Vaje pri predmetu Načrtovanje in sinteza učinkovin
Poročilo o opravljeni vaji

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?