

# Tím 20- FOTOTOX

## Zápisnica zo stretnutia č. 2

Dátum a čas stretnutia: 12.10. 13:00

### Riešené problémy

- Tautóméria pri chemických zlúčeninách
  - U izomérov sa líšia nielen SMILES kódy, ale môžu sa líšiť aj fyzické vlastnosti vrátane fototoxicity
  - Nejde zistiť, čo sa presne používalo, pravdepodobne zmes oboch izomérov
- Identifikácia dôležitých vlastností zlúčenín
- Zlý formát dát v OECD softvéri

### Hotové úlohy

- Preštudovať zadané zdroje
- Vytiahnuť dáta o FT z pdf dokumentu
- Vytvoriť nástroj na automatické získavanie dát z PubChemu
- Vytvoriť tasky v Jire
- Vytvoriť template k zápisniciam
- Prvotná analýza dostupných dát

### Nové úlohy

- Extrahovať ďalšie dáta z článkov a pridať údaje z PubChemu
- Pridať dáta z ďalšieho poslaného excelu
- Podať prihlášku na TP-Cup