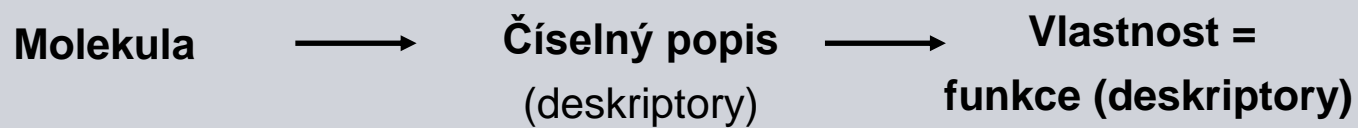
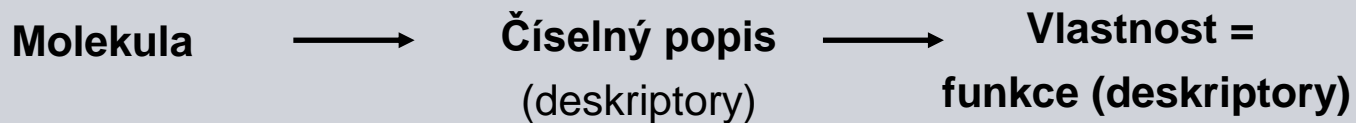


Deskriptory – úvod



Deskriptory – úvod



Ilustrativní příklad ze života:



Tělo člověka



Výška a váha

$$\text{BMI} = \text{váha} / \text{výška}^2$$

BMI (Body Mass Index):

Podváha: BMI < 18,5

Obezita: BMI > 30

Molekula \longrightarrow Číselný popis (deskriptory) \longrightarrow Vlastnost = funkce (deskriptory)

Ilustrativní příklad ze života:



Tělo člověka



Výška a váha

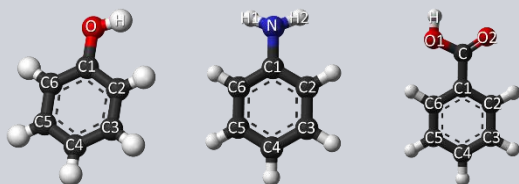
BMI = váha / výška²

BMI (Body Mass Index):

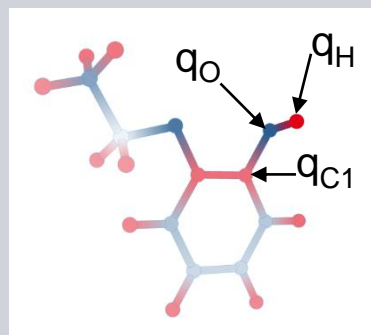
Podváha: BMI < 18,5

Obezita: BMI > 30

Chemoinformatika



3D struktura molekuly



Náboje na atomech

$$pK_a = c_H \cdot q_H + c_O \cdot q_O + c_{C1} \cdot q_{C1}$$

Kde c_H , c_O a c_{C1} jsou parametry