
OBSAH

ÚVODNÍK	709
REFERÁTY	
Lineární reprezentace chemických struktur	710
J. Jiráat a D. Svozil	
Popis a určování podobnosti molekul s pomocí molekulárních deskriptorů	716
J. Novotný a D. Svozil	
Chemický prostor	724
I. Čmelo a D. Svozil	
Databázové zdroje v chemii	731
J. Jindřich	
Virtuální screening	738
D. Svozil	
QSAR – modelování kvantitativních vztahů mezi strukturou a aktivitou chemických látek	747
C. Škuta a D. Svozil	
Molekulové dokování jako nástroj pro virtuální návrh léčiv	754
M. Šicho a D. Svozil	
Odhadování syntetické dostupnosti při počítačovém návrhu léčiv	760
M. Voršilák a D. Svozil	
Laboratorní informační systémy pro testování s vysokou propustností	766
T. Müller, D. Sedlák a P. Bartůněk	
Compound management – správa knihoven chemických látek pro testování biologické aktivity s vysokou propustností	772
M. Popr, D. Sedlák a P. Bartůněk	

CONTENTS

EDITORIAL	709
REVIEW ARTICLES	
Linear Representation of Chemical Structures	710
J. Jiráat and D. Svozil	
Characterization and Similarity Measurement of Molecules Using Molecular Descriptors	716
J. Novotný and D. Svozil	
Chemical Space	724
I. Čmelo and D. Svozil	
Database Resources in Chemistry	731
J. Jindřich	
Virtual Screening	738
D. Svozil	
QSAR – Modelling of Quantitative Relations between Structure and Activity of Chemical Compounds	747
C. Škuta and D. Svozil	
Molecular Docking as a Tool to Virtually Develop Drugs	754
M. Šicho and D. Svozil	
Estimation of Synthetic Accessibility during Computational Drug Design	760
M. Voršilák and D. Svozil	
Laboratory Information Systems to High-Throughput Screening	766
T. Müller, D. Sedlák, and P. Bartůněk	
Compound Management – Maintenance of Chemical Compound Libraries for Use in High Throughput Screening	772
M. Popr, D. Sedlák, and P. Bartůněk	

CHEMICKÉ LISTY • ročník/volume 111 (2017), čís./no. 11 • LISTY CHEMICKÉ, roč./vol. 141, ČASOPIS PRO PRŮMYSL CHEMICKÝ, roč./vol. 127 • ISSN 0009-2770, ISSN 1213-7103 (e-verze) • evidenční číslo MK ČR E 321 • Vydává Česká společnost chemická jako časopis Asociace českých chemických společností ve spolupráci s VŠCHT Praha, s ČSPCH a ÚOCHB AV ČR za finanční podpory Rady vědeckých společností ČR, Akademie věd ČR, Nadace Český literární fond a kolektivních členů ČSCH • IČO 444715 • Published by the Czech Chemical Society • VEDOUCÍ REDAKTOR/EDITOR-IN-CHIEF: B. Kratochvíl • REDAKTOŘI/EDITORS: J. Barek, Z. Bělohav, E. Benešová, P. Drašar, P. Holý, P. Chuchvalec, Z. Kolská, J. Podešva, P. Rauch; Bulletin: P. Drašar; Webové stránky: R. Liboska, L. Matějová • ZAHRANIČNÍ A OBLASTNÍ REDAKTOŘI/FOREIGN AND REGIONAL EDITORS: F. Švec (USA) • TECHNICKÁ REDAKTORKA/EDITORIAL ASSISTANT: R. Rápková • REDAKČNÍ RADA/ADVISORY BOARD: K. Bláha, L. Červený, E. Dibuszová, J. Hanika, Z. Havlas, Z. Hostomský, J. Káš, M. Koman, J. Koubek, K. Melzoch, V. Pačes, V. Růžicka, I. Stibor, V. Šimánek, R. Zahradník, J. Zima • ADRESA PRO ZASÍLÁNÍ PŘÍSPĚVKŮ/MANUSCRIPTS IN CZECH, SLOVAK OR ENGLISH CAN BE SENT TO: Chemické listy, Novotného Lávkva 5, 116 68 Praha 1; tel./phone +420 221 082 370, +420 222 220 184, e-mail: chem.listy@csvts.cz • INFORMACE O PŘEDPLATNÉM, OBJEDNÁVKY, PRODEJ JEDNOTLIVÝCH ČÍSEL A INZERCE/INFORMATION ADS: Sekretariát ČSCH, Novotného lávkva 5, 116 68 Praha 1; tel. +420 222 220 184, e-mail: chem.spol@csvts.cz, chem.ekonom@csvts.cz • PLNÁ VERZE NA INTERNETU/FULL VERSION ON URL: <http://www.chemicke-listy.cz> • TISK: Garamon s.r.o., Wonkova 432, 500 02 Hradec Králové • SAZBA, ZLOM: ČSCH, Chemické listy • Copyright © 2017 Chemické listy/Česká společnost chemická • Cena výtisku 180 Kč, roční plně předplatné 2017 (12 čísel) 1810 Kč, individuální členské předplatné pro členy ČSCH 900 Kč. Roční předplatné ve Slovenské republice 96 EUR (doručování via SCHS), individuální členské předplatné pro členy ČSCH 73 EUR (doručování via SCHS), 96 EUR + poštovné (individuální doručování), ceny jsou uvedeny včetně DPH • DISTRIBUTION ABROAD: KUBON & SAGNER, POB 34 01 08, D-80328 Munich, FRG • This journal has been registered with the Copyright Clearance Center, 2322 Rosewood Drive, Danvers, MA 01923, USA, where the consent and conditions can be obtained for copying the articles for personal or internal use • Pokyny pro autory najdete na <http://www.chemicke-listy.cz>, zkratky časopisů podle Chemical Abstract Service Source Index (viz <http://cassi.cas.org/search.jsp>) • Chemické listy obsahující Bulletin jsou zasílány zdarma všem individuálním a kolektivním členům ČSCH a ČSPCH v ČR i zahraničí, do všech relevantních knihoven v ČR a významným představitelům české chemie a chemického průmyslu; v rámci dohod o spolupráci i členům dalších odborných společností • Molekulární námět na obálce: P. Holý • Dáno do tisku 30.10.2017.