

---

**OBSAH**

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

---

**CONTENTS**

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