

Streszczenie

Zależność między strukturą a właściwościami jest ważnym elementem chemii. Metodę taką stosuje się na przykład w projektowaniu leków. W rzeczywistości jednak losy leków na rynku determinowane są ekonomią. Obecna praca opisuje po raz pierwszy zależności między strukturą związku chemicznego a jego ceną (quantitative structure-economy relationships: QSER) dla wielkich danych molekularnych opisujących bibliotekę 2,2 mln. związków chemicznych. Niniejsza praca dowodzi także, że binowanie może być efektywną metodą analizy wielkich danych w chemii. Wynikiem obecnej jest statystyka molekularną, która świadczy o tym, że na rynku związków chemicznych średnio płacimy za ilość materii. Rynek substancji chemicznych jest kontrolowany przez wygląd wzorów i grafów molekularnych. Substancje, które mają więcej atomów wyglądają atrakcyjniej i stosownie do tego są również bardziej kosztowne.