

15.11. 2023 8:20

Stále máme málo negatívnych látok pre Amesov test - **pridať prvky**:

- Sacharóza
- Erythritol
- Pozrieť či by sa nedali pridať sladidlá
- Teoreticky prvky, ale mohlo by to trochu rozbiť model
- Európska lieková agentúra - pozrieť či nenájdeme liečivá, ktoré nie sú genotoxické (ak sú info dostupné)
- Skúsiť ešte pohľadať nejaké datasety

Treba pridať tieto negatívne prvky aj do druhého datasetu, nie len pre in vivo.

Pridať deskripty čo našiel Lukáš, kt. súvisia s valenčnými elektrónmi + deskripty z CDkitu

Homolumo knižnica simulovala kvantové počítanie a nezbehol ani prvý prvok - nedostatok výpočtovej sily. Skúsiť to nejak poriešiť.

Web - in progress.