

**DENDRAL :**

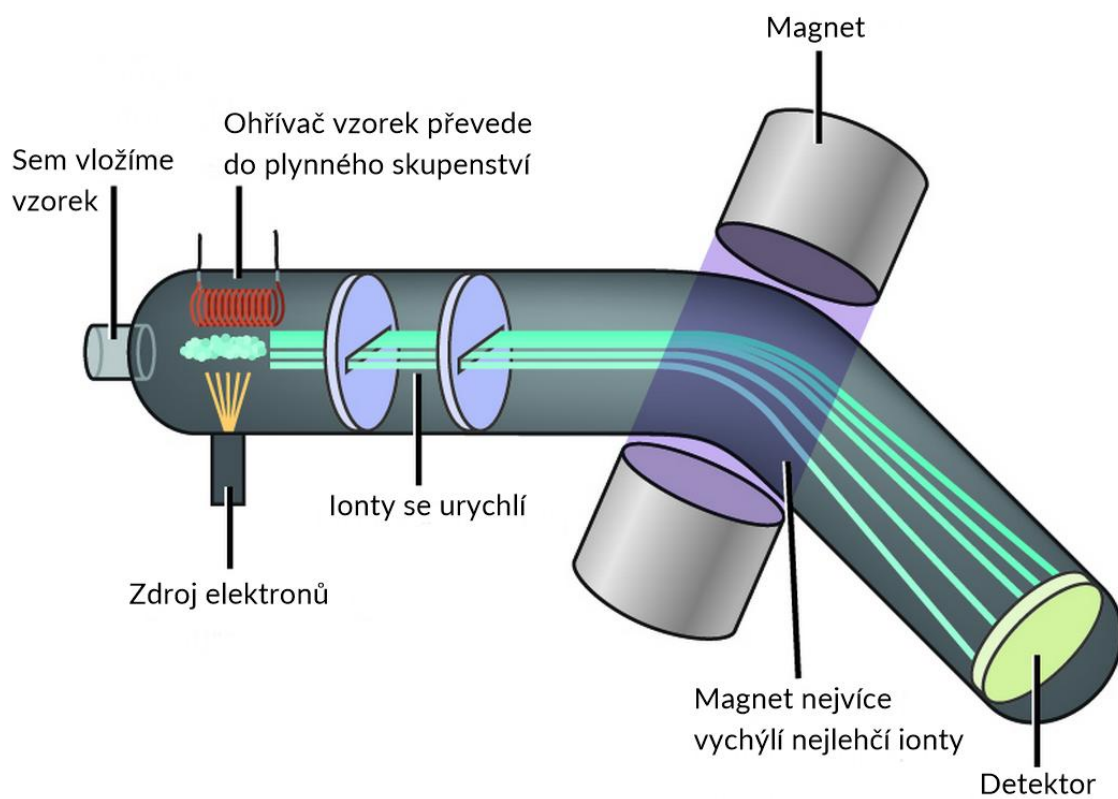
**C<sub>8</sub>H<sub>16</sub>O** ... sumární vzorec znám

Jaká je ale struktura? (vyhovuje tisíce struktur)

Hmotnostní spektrograf (též spektroskop, spektrometr): (ionizátor, elm. analyzátor, detektor počtu)

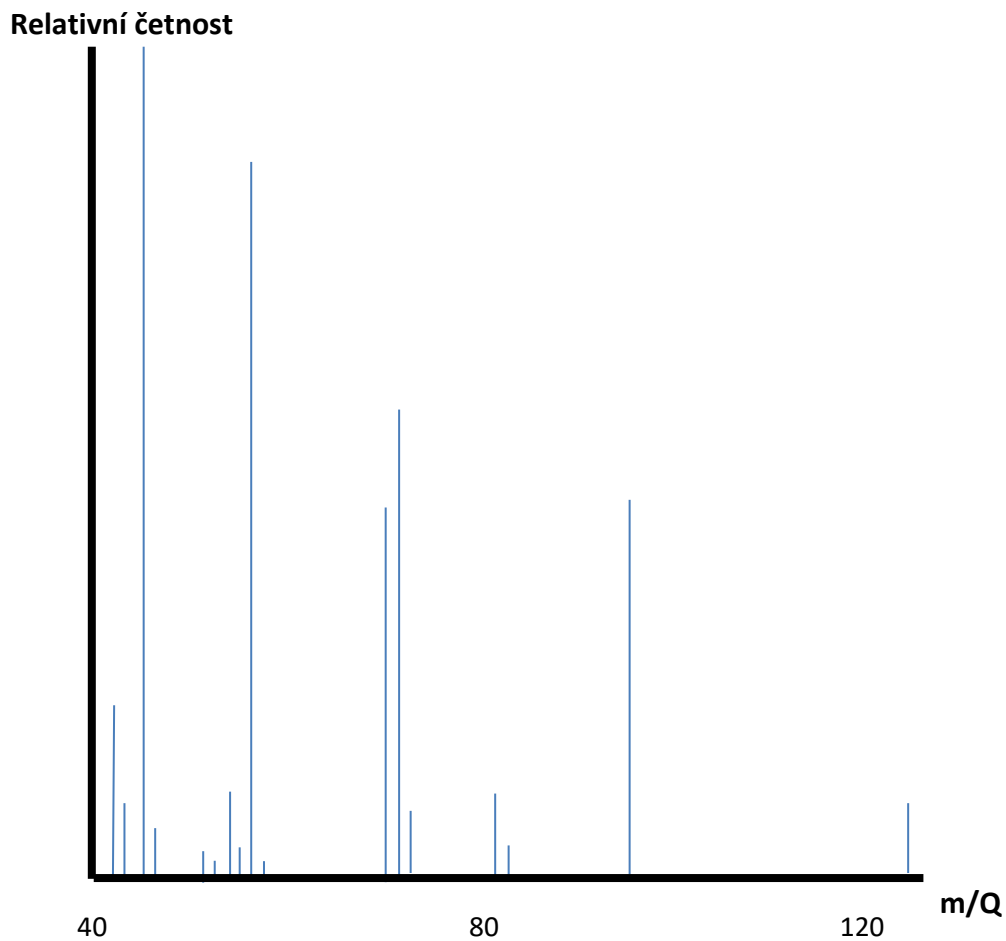
$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} = Q^*(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

$$(\mathbf{F} = m \omega^2 \mathbf{r})$$



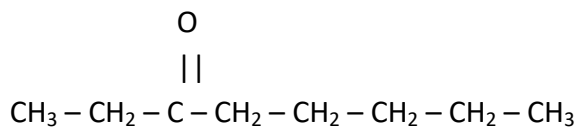
Obrázek získán z: "[Atomic Structure and Symbolism: Figure 5](#)" v [OpenStax Chemistry](#), [CC BY 4.0](#).

Níže shmotnostní spektrogram:



1. Seznam nepřipustných struktur (chemické znalosti, např. o nestabilních konfiguracích => zbývá 698 struktur
2. IF V hm. spektrogramu jsou vysoká maxima na hodnotě 43,71 a 86 AND a nejsou na hodnotě 58 THEN je přítomna n-propyl-3-keťonová podstruktura.

...



3 fáze:

1. Generování (úplné, neopakující se)
2. Testování (srovnání hypotetického spektrogramu s naměřeným)
3. Plánování (s využitím znalostí je použit jen krátký seznam dalších hypotéz pro krok 1.)