

## Streszczenie rozprawy doktorskiej

„Wpływ metody opisu struktury chemicznej cieczy jonowych na zdolność przewidywania w modelach struktura-właściwości”

mgr Anna Rybińska-Fryca

Metoda ilościowej zależności struktura-aktywność/właściwość (QSAR/QSPR) pozwala na oszacowanie właściwości fizykochemicznych oraz aktywności biologicznej różnych grup związków chemicznych, w tym cieczy jonowych. Bazuje ona na założeniu, że możliwe jest powiązanie struktury chemicznej (wyrażonej za pomocą tzw. deskryptorów molekularnych) z modelowaną właściwością dzięki wyznaczeniu odpowiedniej funkcji matematycznej. W przypadku cieczy jonowych możliwe jest zbudowaniu modelu, który opiera się na różnych strategiach opisu struktury chemicznej tych związków, np. obliczone deskryptory mogą opisywać poszczególne jony lub całą parę jonową. Dlatego też głównym niniejszej rozprawy doktorskiej jest weryfikacja hipotezy badawczej, w myśl której, metoda opisu struktury cieczy jonowych wpływa na jakość przewidywania w modelach struktura-aktywność/właściwości (QSAR/QSPR).

Opracowanie oraz analiza szeregu modeli QSAR/QSPR różniących się sposobem opisu cieczy jonowej pozwoliły na weryfikację stawianej hipotezy. Na podstawie wyników badań przeprowadzonych w ramach cyklu trzech prac (**D1-D3**) wchodzących w skład rozprawy doktorskiej można wnioskować, że:

- metoda opisu struktury cieczy jonowych wpływa na jakość przewidywania w modelach struktura-aktywność/właściwości (QSAR/QSPR);
- metoda półempiryczna PM7 jest wystarczająca, aby zbudować wiarygodny model QSPR dla cieczy jonowych przy założeniu, że jony opisywane są osobno;
- uwzględnienie oddziaływania między jonami (optymalizacja geometrii struktury pary jonowej) nie jest konieczne, aby uzyskać wiarygodny model QSPR;
- strategia zakładająca opis związku za pomocą deskryptorów 2D obliczonych dla pary jonowej jest najbardziej korzystana, zarówno pod względem wartości miar opisujących jakość modelu, jak i możliwości jego ponownego wykorzystania.

Wyniki prezentowane w rozprawie doktorskiej to kolejny krok w kierunku rozwoju metod komputerowych pozwalających na ocenę ryzyka cieczy jonowych. Stanowią podsumowanie wpływu metody opisu struktury cieczy jonowych na jakość modeli QSAR/QSPR oraz dostarczają wytyczne dotyczące optymalnego wyboru metod obliczania deskryptorów molekularnych dla cieczy jonowych w modelowaniu QSAR/QSPR.