

# Nowe aspekty chiralnej analizy QSPR

## Streszczenie

Chiralność jest właściwością wielu związków chemicznych. Odgrywa istotną rolę we wszystkich obszarach współczesnej chemii, a szczególnie w chemii leków, gdyż większość obecnych na rynku leków zawiera substancje chiralne. Z drugiej strony, wydaje się, że chiralność nie jest dobrze reprezentowana w analizie QSAR/QSPR (ilościowa zależność struktura-aktywność/właściwość). W swoich badaniach starałem się nieco uzupełnić tę lukę.

Po pierwsze, wprowadziłem miary chiralności typu Sinister-Rectus ( $^{SR}CM$ ), które są ilościowymi deskryptorami chiralności, do równań QSAR modelujących powinowactwo steroidów wobec globuliny wiążącej hormony płciowe.<sup>1</sup> Te wstępne badania rozszerzyłem przez użycie dużego zestawu deskryptorów i algorytmu Genetic Function Approximation, aby pokazać możliwość niestronniczego zastosowania miar chiralności w analizie QSAR.<sup>2</sup>

W dalszych badaniach, pokazałem jako pierwszy istnienie efektu podstawnikowego w widmach Oscylacyjnego Dichroizmu Kołowego (VCD) – ważnej techniki analitycznej współczesnej chemii związków chiralnych.<sup>3,4</sup> W innej pracy, przedstawiłem zależność pomiędzy lokalnymi miarami chiralności, a parametrami widm spektroskopii oscylacyjnej.<sup>5</sup>

Na koniec, znalazłem wstępne przesłanki świadczące o prawdziwości hipotezy, że ligandy danego celu molekularnego mogą być opisane charakterystycznymi zakresami miar chiralności.<sup>6</sup>

Materiał pracy doktorskiej został albo zostanie opublikowany w czasopiśmie indeksowanym przez Journal of Citation Reports. Niniejsza rozprawa jest przewodnikiem po trzech opublikowanych artykułach (oznaczonych odnośnikami 1,4 i 5). Dla pełnego obrazu badań opisane zostały także przygotowane manuskrypty będące w trakcie procesu publikacyjnego, (oznaczone odnośnikami 2, 3 i 6) lecz nie będące formalną podstawą doktoratu.