

## *Streszczenie*

### **Właściwości kwantowe fragmentów cząsteczek jako deskryptory molekularne**

W niniejszej pracy doktorskiej podjęto się zdefiniowania nowej grupy deskryptorów molekularnych będących pochodną obliczeń metodami chemii kwantowej. Wartości proponowanych deskryptorów wyznaczone są na podstawie właściwości kwantowych wykrytych fragmentów cząsteczek chemicznych. Wyprowadzono trzy definicje nowych deskryptorów molekularnych i zbadano możliwości zbudowania na ich podstawie modeli struktura - aktywność lub właściwość na podstawie w sumie 13 różnych dostępnych baz danych. Ponadto, wykonano obliczenia kwantowe dla 4326 związków z których 4082 zakończyło się sukcesem, co pozwoliło na rozszerzenie zbioru dostępnych fragmentów związków. Przeprowadzone badania wykazały, że modele uczenia maszynowego zbudowane w oparciu o deskryptory molekularne zdefiniowane na podstawie właściwości kwantowych fragmentów związków dają predykcje dokładniejsze niż linie bazowe. W ramach prowadzonych badań przedstawiono jedną definicję, stanowiącą modyfikację znanych w chemoinformatyce par atomów. Zaproponowana definicja pozwoliła na dokładniejsze przewidywanie aktywności lub właściwości niż część tradycyjnych, ugruntowanych już metod chemo-informatycznych.

# *Abstract*

## **Quantum properties of molecular fragments as molecular descriptors**

The aim of the following PhD Thesis was to define a new group of molecular descriptors that are derived from computational quantum chemistry. The values of the proposed descriptors are calculated from quantum properties of detected molecular fragments. Three definitions of the new molecular descriptors are introduced and the possibility to build upon them structure - activity or structure - property predictive models is estimated based on 13 different databases. Furthermore, during the realization of the PhD Thesis additional quantum chemistry calculations were conducted on 4326 molecules of which 4082 succeeded, which allowed to expand the number of possible molecular fragments that are searched for. The conducted research showed that machine learning models built upon the descriptors derived from quantum properties of molecular fragments yield predictions superior than the baseline. As part of the conducted research, one definition was presented, which is a modification of atom pairs known in cheminformatics. The proposed definition allowed more accurate prediction of activity or properties than some of the traditional, well-established cheminformatics methods.