

# Indeksy teorii funkcjonałów gęstości i teorii informacji, jako narzędzia do badania reaktywności układów chemicznych oraz ich zastosowania.

Meressa Abrha Welearegay

Promotor

Prof. dr. hab. Andrzej Holas

Promotor pomocniczy

Dr. Robert Balawender

## **Streszczenie pracy doktorskiej**

Ogólnym tematem tej rozprawy jest pokazanie użyteczności wskaźników opartych na teorii funkcjonałów gęstości (DFT) i teorii informacji (IT) jako źródła i nośnika informacji o strukturze i reaktywności cząsteczek.

Jednym z głównych celów podjętych w tej pracy jest zainicjowanie wykorzystania pochodnych alchemicznych w badaniu „przestrzeni związków chemicznych”. W tym celu zdefiniowano metodologię pochodnych alchemicznych oraz indeksów na nich bazujących. Określono wpływ funkcji bazy na jakość otrzymywanych wyników, zarówno ilościowych, jak i jakościowych. Jako przykładowe transmutacje pokazujące możliwości tej metody, szereg przykładów o wzrastającej złożoności został przebadany: reakcja deprotonacji, transmutacji cząsteczki azotu, podstawienia pary węgla przez atom boru i azotu oraz zamiana grupy C-H na atom azotu. Obserwowane trendy dla energii deprotonacji potwierdzają użyteczność wskaźników alchemicznych w badaniach reaktywności chemicznej. Wyniki obliczeń pochodnych BN benzenu i pirenu pokazują duży potencjał tej metody w efektywnym i precyzyjnym przeszukiwaniu przestrzeni związków chemicznych. Wstępne wyniki badania aktywności rakotwórczej policyklicznych węglowodorów aromatycznych (PAH) wzmacniają tę opinię.

Szczegółowo przebadano metodologię opisywania własności atomowych i cząsteczkowych przy użyciu teorii informacji. Miary teorii informacji, będące funkcjonałami gęstości elektronowej lub funkcji kształtu, zostały szeroko i szczegółowo przebadane z wykorzystaniem pojęć przenoszalności i addytywności atomów i grup funkcyjnych. Pokazano, że użycie funkcji kształtu, jako argumentu funkcjonalnego prowadzi do wyników sprzecznych z „intuicją” chemiczną.

Warto podkreślić otrzymanie linowych korelacji pomiędzy energią kinetyczną a informacją Fishera i informacją Onicescu oraz pomiędzy energią atomizacji a entropią atomizacji. Analiza płaszczyzn informacyjnych pokazała, że najbogatsza informacja o wzorcach, organizacji, podobieństwach cząsteczek jest zawarta w płaszczyźnie informacji Shanona-Fishera niż w płaszczyznach Shannona-Onicescu czy Fisher-Onicescu. Stwierdzono że miary IT mogą być użyte w badaniach reaktywności chemicznej jako źródło informacji o strukturze, organizacji, podobieństwa cząsteczek, lecz nie jako bezpośrednie wskaźniki ich reaktywności.

W ostatniej części zaproponowano modele klasyfikacji rakotwórczej aktywności PAH przy wykorzystaniu metody maszyn wektorów nośnych (support vector machines). Bazując na wskaźnikach związanych z budową cząsteczek i jej własnościami otrzymano 93 % dokładność klasyfikacji. Współczynnik korelacji pomiędzy przewidywanymi a eksperymentalnymi wskaźnikami rakotwórczości wyniósł 0,9475.

Wykorzystany w pracy zestaw cząsteczek był na tyle duży i różnorodny, że pozwolił na lepsze zrozumienie badanych zależności oraz na uogólniające wnioski.