

Streszczenie

Celem pracy była próba wykorzystania deskryptorów molekularnych oraz właściwości farmakologicznych i ekonomicznych wybranych szeregów leków oraz materiałów, w tym listy bestsellerów farmakologicznych (TOP100 lata 2000 do 2019) oraz listy FDA *approvals* (lata 1985 do 2019) do analizy ekonomicznych aspektów projektowania molekularnego. Formalnie podstawową metodą analizy była fragmentacja analizowanych związków. Jedną z metod analizy fragmentów w projektowaniu leków jest metoda efektywności liganda „*Ligand Efficiency*” LE. Przeanalizowano zmiany LE dla szeregu leków zarejestrowanych przez FDA i zaproponowano alternatywne narzędzie, *Product Ligand Efficiency*, PLE.

Ekonomia ma decydujące znaczenie w projektowaniu leków i materiałów. Niestety dane ekonomiczne są trudno dostępne. Lista bestsellerów leków jest tutaj wyjątkiem. Porównano najczęściej występujące fragmenty TOP100 vs. wszystkie leki zatwierdzone przez FDA od roku 1985. Czy podobnie jak w przypadku tzw. fragmentów uprzywilejowanych farmakologicznie można wyodrębnić podobne struktury istotne dla ekonomii?

Jest pewnym paradoksem, że w projektowaniu materiałów istotnym mankamentem jest brak baz danych zawierających właściwości syntezowanych układów molekularnych. Przygotowano zestawienie danych dostępnych literaturowo dla wybranych szeregów fotoreagentów. Zintegrowane zostaną one z bazą *Catalytic Material Database*, zawierającą dane o heterogenicznych katalizatorach metanowania (<http://cmd.us.edu.pl/catalog/>).