

Skale molowe lub wagowe są typowymi reprezentacjami właściwości mierzonych dla substancji. W ostatnich latach reprezentacje te poszerzono o tak zwaną skalę pojedynczej cząsteczki (ang. *single molecule biology*). W pracy porównano duże zbiory danych aktywności biologicznej (ChEMBL, PubChem), analizując ich związek z wyżej wymienionymi reprezentacjami. Problem maksymalizacji siły działania leku jest istotny dla projektowania leków. Wyrazem tego jest funkcja wydajności liganda (LE) obliczana jako stosunek  $pIC_{50}$  do liczby zliczeń ciężkich atomów (HAC), która może być interpretowana jako jedna z typów reprezentacji właściwości. Najczęściej LE bada się przy tym jako funkcję HAC. W niniejszej pracy LE porównano z szeregiem innych właściwości substancji, typowo mierzonych w skali molowej lub wagowej. Poprawność definicji LE jest przedmiotem kontrowersji w literaturze projektowania leków. Stało się to inspiracją do opracowania szeregu nowych estymatorów wydajności ligandów PLE, pPLE oraz SCORE, które zdefiniowano i badano w niniejszej pracy.

LE może być interpretowane zarówno w skali pojedynczej cząsteczki, charakteryzując aktywność (siłę działania) pojedynczego HAC. Jest to więc metoda fragmentacji cząsteczki. Dualizm związków chemicznych (substancja, molekula) decyduje o niejednoznaczności takiego podziału. Niejednoznaczność tę opisać możemy paradoksem podobnym do paradoksu Zenona odnoszącym się do niejednoznaczności ciągłego i dyskretnego podziału czasu i przestrzeni.

