

## Abstrakt

Cílem diplomové práce je studium vlivu substituentů na absorpční molekulová spektra derivátů *N*-benzylsalicylthioamidu v ultrafialové oblasti, dále pak studium vztahů mezi strukturou studovaných látek a jejich retenčním chováním ve vysokoúčinné kapalinové chromatografii. Všechny studované deriváty vykazují v ultrafialové oblasti dvě absorpční maxima při vlnových délkách přibližně 260 nm a 293 nm. Substituce auxochromním substituentem na acylovém kruhu vede k hyperchromnímu efektu zejména prvního absorpčního maxima a k bathochromnímu efektu. Přítomnost auxochromů na amidovém kruhu, s výjimkou nepolárních alifatických substituentů, vede rovněž k hyperchromnímu efektu. Dále byly pomocí HPLC chromatografie na koloně s obrácenou fází XDB-C18 ZORBAX v mobilní fázi acetonitril-voda s proměnlivým složením acetonitrilu naměřeny retenční časy studovaných derivátů. Byly nalezeny korelační rovnice mezi retenčním faktorem pro mobilní fázi s nulovým obsahem acetonitrilu, resp. směrnici závislosti logaritmu retenčního faktoru na objemovém zlomku acetonitrilu v mobilní fázi a rozdělovacím koeficientem oktanol-voda, resp. substituentovými konstantami hydrofobicity.

**Klíčová slova:** QSAR, HPLC, spektrometrie, benzylsalicylthioamidy