

## ABSTRAKT

Cílem této práce je vypočítat parametry substituovaných bází fenylguanidinů a vybraných kationtů fenylguanidinia, již dříve syntetizovaných na katedře anorganické a organické chemie na Farmaceutické fakultě UK v Hradci Králové, pomocí kvantově chemických metod.

Zvolený problém jsem vyřešil pomocí počítačových programů Gaussian 03W a HyperChem 8.0.10. Program Gaussian jsem použil k optimalizaci molekul a výpočtu energií HOMO a LUMO, celkové energie a atomového parciálního náboje pomocí Mullikenovy populační analýzy. Program HyperChem jsem použil k výpočtu van der Waalsova molekulového objemu; van der Waalsova molekulového povrchu; logP; molární refrakce; rozpouštědlnosti přístupného povrchu s velikostí sondy 1,0 Å; 1,2 Å; 1,4 Å; 1,6 Å a atomového parciálního náboje pomocí metody PEOE.

Pro zvolený okruh substituovaných fenylguanidinů byly úspěšně vypočítány všechny výše uvedené parametry a uvedeny do tabulek v kapitole výsledky. Vypočítané výsledky jsem rozebíral v kapitole diskuze.

Vypočítané parametry budou dále použity ke korelacím a QSAR studiím, které pomohou lépe pochopit biologickou aktivitu substituovaných fenylguanidinů a tím i jejich účinek na lidský organismus.