

## ABSTAKT

V rané fázi návrhu a vývoje léčiv musí vědci překonat řadu výzev spojených s identifikací potenciálních sloučenin s drug-like nebo lead-like vlastnostmi. To vedlo k potřebě vytvoření velkých souborů chemických dat, které pomohou zlepšit identifikaci farmakoforů a účinných sloučenin. Různé vědecké obory, zejména farmakologie, farmaceutická chemie a biochemie, začaly využívat počítačové vědy k vyhledávání potenciálních vůdčích struktur (leads) s větší specifičností, pokud jde o jejich bioaktivitu. Hlavním cílem této práce bylo vytvoření databáze obsahující sbírku derivátů pyrazinu syntetizovaných v minulosti na Farmaceutické fakultě Univerzity Karlovy v Hradci Králové se zaměřením na sloučeniny s potenciální antimykobakteriální (a dále antibakteriální a antifungální) aktivitou, a dále využití této databáze k výpočtu hodnot deskriptorů důležitých pro farmakokinetické vlastnosti a biologickou dostupnost. Tento projekt se snaží ukázat, jak mohou být určité molekulární deskriptory použity jako spolehlivá informace k určení pravděpodobnosti nebo možnosti vývoje lead-like nebo drug-like sloučeniny pomocí počítačového softwaru. Byla vytvořena interní databáze 623 sloučenin uložených ve formátu SMILES, která byla použita k určení kvantitativních vztahů mezi strukturou a aktivitou (QSAR) a k analýze toho, zda byly syntetizovány optimální sloučeniny splňující lead-like nebo drug-like kritéria. Databáze může být použita k návrhu budoucích syntéz s využitím CADD (počítačem podporovaný vývoj léčiv).