

V této práci jsou studovány biologicky významné komplexy, analogy cisplatiny, s centrálním atomem platiny ve stavu Pt(II) - trans-Pt[Cl<sub>2</sub>(NH<sub>3</sub>)(thiazol)], Pt[Cl(dietylentriamin)]<sup>+</sup>, cis-Pt[Cl<sub>2</sub>(NH<sub>3</sub>)(piperidin)] a JM118 – komplex cis-Pt[Cl<sub>2</sub>(NH<sub>3</sub>)(cyklohexylamin)]. Dále s centrální platinou ve stavu Pt(IV) - JM149 – komplex cis-Pt[Cl<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub>(NH<sub>3</sub>)(cyklohexylamin)] a JM216 – komplex cis-Pt[Cl<sub>2</sub>(acetyl)<sub>2</sub>(NH<sub>3</sub>)(cyklohexylamin)]. U všech komplexů s výjimkou JM118 jsou spočteny hydratační reakce, tedy nahrazení chlorových ligandů aqua ligandy. Rovněž byly provedeny termodynamické a kinetické analýzy těchto reakcí a nábojové analýzy NPA jednotlivých reagujících komplexů. Veškeré optimalizace jsou provedeny metodou DFT s funkciónálem B3LYP. Reakce se odehrávají ve vakuu v přiblížení supermolekulárních komplexů.