

Bylo prokázáno, že rutheniové a platinové komplexy jsou aktivní v protirakovinové léčbě. Dnes běžně používaná chemoterapeutika mají stále hodně negativních vedlejších účinků, proto je výzkum v této oblasti stále aktuální. První část diplomové práce se zabývá studiem  $\text{cis-}[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$  (cisplatina, DDP) a čtyř platinových komplexů, potenciálních léčiv proti rakovině:  $\text{PtCl}_2(\text{diaminocyklohexan})$ ,  $\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)(\text{cyklohexylamin})$  (JM118),  $\text{cis-}[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)(\text{piperidin})]$  a  $\text{trans-}[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)(\text{thiazol})]$ . Tyto komplexy jsou studovány v semi-hydratované a plně-hydratované formě. Termodynamické a kinetické parametry reakcí těchto komplexů s guaninem, což je klíčový proces pro zahájení protirakovinné aktivity, jsou studovány QM metodami. Analýzy elektronové hustoty byly provedeny na úrovni B3LYP/6-311++G(2df,2pd) v IEF-PCM modelu. V druhé části práce je studována reakce tzv. 'piano stool' komplexu ruthenia,  $[\text{Ru}(\text{II})(\eta^6\text{-p-cymen}(\text{nalidixová kyselina})(\text{Cl}))^+$ , nejdříve s guaninem pomocí QM metod a poté s modelem ds-DNA pomocí QM/MM metod. Reakční centrum popisované QM metodami tvoří dva guaniny a Ru(II) komplex. Analýzy termodynamických a kinetických parametrů a analýzy elektronových hustot byly provedeny na úrovni B97D/6-31G\*. Všechny studované reakce jsou exotermní a budou probíhat spontánně.