

Při vývoji nových materiálů či léčiv zaujímají v poslední době kvantově-chemické metody důležitou roli. V rámci této disertační práce jsou využity při studiu platinových komplexů představujících potencionální protirakovinná léčiva. Interakce pěti hydratovaných Pt(II) komplexů s guaninem je studována pomocí DFT metod. U cytostatik na bázi Pt(IV) komplexů je však pozorováno méně vedlejších účinků a zároveň překonávají rezistenci některých nádorů vůči cisplatině. Obecně jsou ale vysoce kinecky inertní, a proto musí být v organismu redukovány, aby bylo dosaženo jejich protirakovinné aktivity. Z tohoto důvodu jsou stanoveny redukční potenciály pro jedenáct Pt(IV) komplexů pomocí DFT výpočtů a post-Harteeho-Fockových metod. Kinetika však hraje zásadní roli v případě redukce těchto sloučenin, a proto je zkoumán reakční mechanismus odpovídající redukci tetraplatiny v přítomnosti deoxyguanosin monofosfátu a redukci satraplatiny pomocí kyseliny askorbové. Jelikož se uvažovaná redukční činidla vyskytují při neutrálním pH v různých protonačních stavech, efektivní rychlostní konstanty jsou stanoveny pomocí vztahů pro boční reakce.

Při interakci kovových kationtů s thyminem představují přenosy protonů velmi důležitou část reakce. Přítomnost hydratovaných  $Mg^{2+}$ ,  $Zn^{2+}$ ,  $Hg^{2+}$  kationtů vede k výraznému snížení aktivační bariéry v rámci přenosu protonu mezi dusíkem N3 a kyslíkem O2. Samotné navázání hydratovaného  $Hg^{2+}$  kationtu do pozice N3 methylthyminu je studováno pomocí QM/MM Umbrella Sampling molekulové dynamiky a získané výsledky jsou porovnány s DFT výpočty. Vazebné a Lennardovy-Jonesovy molekulově-mechanické parametry, které jsou konzistentní s General Amber Force Field, jsou odhadnuty na základě kvantově-chemických výpočtů pro celou první řadu přechodných kovů, Ru, Rh, Pt a Hg.