

INTERAKCE KOVOVÝCH IONTŮ V BIOORGANICKÉM PROSTŘEDÍ
kvantově–chemická a molekulově–mechanická výpočetní studie

Zdeněk Futera

Biologicky významné interakce piano–stool Ru(II) komplexů s DNA jsou v této práci studovány QM/MM výpočetní metodou. Reakční mechanismus je rozdělen do tří částí — hydratace $[\text{Ru}^{\text{II}}(\eta^6\text{-benzene})(\text{en})\text{Cl}]^+$ komplexu, následné navázání na DNA a vytvoření můstku mezi dvěma guaniny na stejném vlákně. Profily volné energie všech studovaných reakcí jsou spočteny metodou umbrella sampling z QM/MM MD simulací během nichž byl Ru(II) komplex popsán na úrovni DFT. Pro tento účel byl vytvořen QM/MM software, který umožňuje provázat programy Gaussian a Amber. Spočtené energetické bariéry hydratační reakce a procesu navázání Ru(II) komplexu na DNA jsou v souladu s experimentálně změřenými rychlostními konstantami těchto reakcí. Vytvoření můstků bylo předpovězeno jako uskutečnitelné z termodynamického i kinetického hlediska.