

U platinových komplexů byly stejně jako u mnoha sloučenin dalších tranzitních kovů prokázány protirakovinné účinky. Cílem dnešní medicíny je nahradit používané cisplatinové komplexy látkami, které vykazují méně vedlejších účinků. Tato práce se zabývá reakcí 5'-dGMP (2'-deoxyguanosin-5'-monofosfát) a cGMP (cyklický 2'-deoxyguanosinmonofosfát) s platičtým komplexem $\text{Pt}^{\text{IV}}(\text{dach})\text{Cl}_4$ (dach=diaminocyklohexan). V oxidačním procesu GMP pomocí tetraplatiny dochází nejprve k jeho navázání na guanin do pozice N7. Následuje nukleofilní atak 5'-fosfátu nebo 5'-hydroxyly na uhlík C8 guaninu, kdy dojde k přenosu dvou elektronů a výsledkem reakce je 8-oxo-guanin a $\text{Pt}^{\text{II}}(\text{dach})\text{Cl}_2$. Vzniklý Pt(II) komplex narozdíl od kineticky inertního reaktantu vykazuje protirakovinnou aktivitu. U cGMP končí mechanismus substituční reakcí za vzniku $\text{Pt}^{\text{IV}}(\text{dach})\text{Cl}_3(\text{N7-cGMP})$. Optimalizace struktur jsou provedeny na úrovni DFT s funkcí B3LYP v bázi 6-31G(d) s použitím implicitního solvatačního modelu IEFPCM/UA0. Na úrovni B3LYP/6-311++G(2df,2pd) v solvatačním modelu IEFPCM/sUAKS byly dále stanoveny energetické parametry reakce. Nakonec byly ze znalosti tranzitních stavů určeny rychlostní konstanty a porovnány s experimentálními hodnotami.