

Táto práca sa zaoberá reakciami diaqua-tetrakis(μ -acetylato)dirhódia(II,II) s guanínom, ktorý vykazuje protirakovinové účinky. Guanín sa na komplex môže viazať buď kyslíkom O6 alebo dusíkom N7. Uvažovali sme tri možné varianty systému – protonovaný na guaníne, protonovaný na paddle-wheel štruktúre a neutrálny systém. Pre všetkých 6 reakcií boli nájdené tranzitné štruktúry. Spočítali sme hodnoty elektrónovej hustoty v kritických bodoch väzieb, parciálne náboje na atómoch a interakčné energie systému, vody a guanínu pre reaktanty, tranzitné stavy a produkty na úrovni b3lyp/aug-cc-pvdz. V prípade rhódií bola použitá pseudobáza a pseudopotenciály. Spočítali sme termodynamické parametre všetkých reakcií.