

Název práce: Teorie a aplikace optických spektroskopických metod pro strukturní studie molekul

Autor: RNDr. Jana Hudecová

Katedra / Ústav: Ústav organické chemie biochemie AVČR, v.v.i.

Vedoucí doktorské práce: Prof. RNDr. Petr Bouř, DSc.

Abstrakt:

V dizertační práci byly použity metody chiroptické spektroskopie (Ramanova optická aktivita, elektronový a vibrační cirkulární dichroismus a cirkulárně polarizovaná luminiscence) k získání informací o struktuře chirálních molekul. Ve čtyřech hlavních projektech jsme se zaměřili na vylepšování přesnosti kvantově-chemických výpočtů potřebných pro interpretaci změřených spekter, zahrnutím anharmonických korekcí, rozpouštědla, flexibility molekul a dynamických efektů. V prvním projektu jsme se věnovali metodě optimalizace geometrie v normálních módech a našli optimální frekvenční limit zajišťující realistické rozšíření vibračních pásů. Dále jsme zkoumali schopnost harmonických a anharmonických výpočetních přístupů popsat C-H valenční vibrace pro tři molekuly terpenů a čtyři spektroskopické metody. Třetí projekt byl zaměřen na roli disperzních sil u různých organických rozpouštědel pro konformační rovnováhu a dynamiku cyklických dipeptidů obsahujících tryptofan. V posledním projektu pomohla volná energie získaná z molekulárně-dynamických simulací vysvětlit spektrální intenzity cirkulárně polarizované luminiscence a jejich vztah k pozici histidinu v peptidovém řetězci.

Klíčová slova: chiroptická spektroskopie, Ramanova optická aktivita, kvantově-chemické výpočty, konformační flexibilita, anharmonické korekce