

ABSTRAKT

Ab initio molekulová dynamika s neadiabatickými a spin-orbitálními efekty aplikovaná na časově závislou fluorescenci

Marek Pederzoli^{1,2}

¹*Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Physical and Macromolecular Chemistry, Hlavova 8, 12840 Prague 2, Czech Republic*

²*J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Czech Academy of Sciences, Dolejškova 3, 18223 Prague 8, Czech Republic*

Fluorescenční sondy jsou nepostradatelné pro mnoho experimentálních technik používaných v biochemii a mikrobiologii. Přesné simulace těchto molekul jsou z teoretického hlediska výzvou, protože mohou zahrnovat konické intersekcce a mezisystémové přechody i interakce s prostředím.

Tato práce je souborem publikací týkajících se vývoje, implementace a aplikace technik ab initio molekulové dynamiky s neadiabatickými a spin-orbitálními interakcemi, které jsou použitelné pro modelování fluorescenčních sond nejen v plynné fázi, ale také v komplexním prostředí biomembrán.

Úvodní část se týká studia 9H-adeninu pomocí ab initio molekulové dynamiky s neadiabatickou vazbou na TD-DFT úrovni a s použitím dvou single-referenčních metod CC2 a ADC(2).

Hlavní část práce pak popisuje implementaci spin-orbitální vazby do dynamiky s využitím Tullyho metody přeskoků, která je aplikována na deaktivaci thiofenu a selenofenu. Další aplikace zahrnují studium spekter a dynamiky fluorescenční sondy Prodan v plynné fázi i roztoku a simulace absorpčních spekter sondy Laurdan v biomembránách. Studium dalších systémů probíhá a výsledky budou publikovány v dalších článcích. Moje implementace se stala součástí balíku programů Newton-X.