

Název práce: Struktura a dynamika elektronických defektů v kapalně vodě

Autor: Ondřej Maršálek

Ústav: Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky

Vedoucí doktorské práce: prof. Mgr. Pavel Jungwirth, DSc.

e-mail vedoucího: pavel.jungwirth@uochb.cas.cz

Abstrakt: V této práci předkládáme ab initio molekulárně dynamické simulace elektronických defektů v kapalně vodě. Fotoionizací kapalně vody vzniká kationtová díra, která ultrarychlým procesem reaguje na hydratovaný proton a hydroxylový radikál. Studujeme dynamiku i spektroskopii tohoto procesu. Hydratovaný elektron je klíčovým meziproduktem v radiační chemii vodných roztoků. Simulujeme jeho rovnovážné vlastnosti v záporně nabitých vodních klastrech i dynamiku vertikálního záchytu elektronu teplými a studenými klastry. Reakcí hydratovaného elektronu a hydratovaného protonu vzniká vodíkový atom. Tuto reakci zkoumáme za konečné teploty ve větším klastru a detailněji v klastru menším. Protože oba zde studované elektronické defekty jsou náročné systémy s otevřenou slupkou, klademe důraz na ověření nastavení výpočtů. K práci je přiloženo šest publikovaných článků.

Klíčová slova: teorie funkcionálu hustoty, selfinterakční korekce, ab initio molekulární dynamika, hydratovaný elektron, kationtová díra, ionizace vody, fotoionizace, vertikální záchyt elektronu