

Název práce: Magnetický cirkulární dichroismus a aromatické sloučeniny

Autor: Petr Štěpánek

Katedra/Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.

Vedoucí disertační práce: prof. RNDr. Petr Bouř, DSc., Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.

Abstrakt: Práce představuje sérii studií zabývajících se magnetickým cirkulárním dichroismem (MCD), spektroskopickou metodou, u které v posledních letech došlo k intenzivnímu teoretickému rozvoji. Díky vývoji kvantově-chemických programů se otevírají nové možnosti výpočtů a interpretace MCD spekter větších a různorodějších molekul než bylo doposud možné. V představovaných studiích jsme využili nově vyvinutých výpočetních prostředků k rozšíření možných aplikací MCD a představujeme zde MCD například jako metodu pro získání informace o struktuře fullerenu. Dále jsme studovali vliv konformace a implicitního a explicitního rozpouštědla na MCD spektra aromatických amino kyselin s pomocí nově implementovaného alternativního výpočetního postupu využívajícího sčítání přes excitované stavy. Představujeme také teoretické předpovědi spekter nukleárního spinově-indukovaného cirkulárního dichroismu coby nové strukturně-analytické metody.

Klíčová slova: magnetický cirkulární dichroismus, kvantově chemické výpočty, teorie funkcionálu elektronové hustoty, nukleární spinově-indukovaný cirkulární dichroismus