

Dynamika excitovaných stavů izolovaných bází nukleových kyselin je charakterizována velmi krátkou dobou života, v řádu pikosekund, zajišťující fotostabilitu genetického kódu. V molekule nukleových kyselin spolu báze mohou interagovat pomocí patrových interakcí (v rámci jednoho řetězce) nebo vodíkových vazeb (v rámci sousedních řetězců), což výrazně prodlužuje dobu života excitovaných stavů (v řádu nanosekund). Charakter těchto interakcí není dosud zcela objasněn, předpokládá se, že výrazně závisí na typu excitovaného stavu ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ). Cílem práce bylo studovat dynamiku excitovaných stavů dimeru N-methylformamidu v komplexu s molekulami vody v excitovaných stavech  $n \rightarrow \pi^*$  charakteru. K tomu byla použita neadiabatická "surface hopping" dynamická studie používající multi-referenční popis k výpočtu hyperploch potenciální energie a neadiabatických spřažení. Výsledky ukazují, že ve vertikální oblasti delokalizovaná excitace v  $S_2$  stavu se během několika desítek femtosekund relaxuje do  $S_1$  stavu a lokalizuje na jednom monomeru. Během průběhu dynamiky charakter stavu osciluje mezi lokalizovaným a delokalizovaným. Srovnání s výsledky získanými pro dimery bez přítomnosti vody ukazuje, že hlavním činitelem, který způsobuje delokalizaci, jsou molekuly vody.