Název práce: Studium elektronových přeskoků v systému barviv fotosystémů metodami kvantové mechaniky. Simulace absorpčních a emisních fotoelektronových spekter.

Autor: Bc. Radim Cajzl

Katedra: Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí diplomové práce: prof. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc., Katedra chemické fyziky a optiky

Abstrakt: Cílem práce je vypracování metodiky pro simulace dynamických vlastností karotenoidů pomocí OMx metod v kombinaci elektronovou dynamikou. Jako modelové systémy jsou použity lineární konjugované polyeny: ethen, butadien, hexatrien až po řetězec s 22 uhlíky. Nejprve jsou počítána spektra, zde je dosaženo dobrého souhlasu s experimentem při určení pořadí exc. stavů i s ohledem na odchylky od experimentu. Tyto výsledky jsou použity při simulacích elektronové dynamiky pro výpočet středních dob života exc. stavů studovaných polyenů. Řádového souhlasu s experimentem je dosaženo u butadienu, hexatrienu a oktatetraenu. Získané časy pro polyeny s 20 resp. 22 uhlíky odpovídají hodnotám pro chemicky analogické karotenoidy.

Klíčová slova: kvantová mechanika, fotoeletronová spektra, barviva fotosystémů, elektronové přechody, molekulární a elektronová dynamika