

Inverze pořadí singletových a tripletových stavů v organických molekulách

Typ práce: RP, BP, VÚ, DP

Vedoucí práce: RNDr. M. Michl, Ph.D.

Konzultant(i): Ing. M. Dvořák, Ph.D.

Abstrakt:

V organických molekulách s uzavřenou elektronovou slupkou má díky výměnným interakcím zpravidla první tripletový stav nižší energii než první singletový excitovaný stav. Nejnovější výzkumy však ukazují, že pro některé zvláštní struktury molekul mohou jiné faktory nad výměnnou interakcí převážít, takže se vzdálenost zmíněných stavů může významně zmenšit či dokonce může dojít k záměně jejich pořadí. Fotofyzikální vlastnosti takových molekul pak mohou vést k novým aplikacím v organické fotonice. Úlohou studenta bude zpracování rešerše v oblasti hledání vztahu mezi strukturou molekul a jevem singlet-tripletové inverze či v oblasti výpočetních metod umožňujících správnou predikci pořadí singletových a tripletových stavů. Pro pokročilejší studenty přichází v úvahu i návrh vhodných nových sloučenin a jejich teoretické studium pomocí kvantově-chemických metod.