

V této práci byly studovány elektronové přeskoky vybraných heterocyklických systémů a vybraných karotenoidů pomocí simulací QM/MM dynamik excitovaných stavů. V těchto simulacích byly použity teorie Tullyho elektronových přeskoků a semiempirické metody OMx v kombinaci s MRCI metodou. K výpočtům byly použity balíčky Newton-X, MNDO99, MNDO2020 a Gromacs. Na základě těchto simulací byly odhadnuty doby života excitovaných stavů. Výsledky ukazují, že použité metody dobře popisují časový vývoj excitovaných stavů heterocyklických molekul. V případě karotenoidů se podařilo dobře popsat pouze deexcitaci z prvního excitovaného stavu do základního stavu.