

V této práci využíváme metod kvantové chemie a molekulové dynamiky k interpretaci výsledků spektroskopie dvou rheniových donor-akceptorových komplexů $\text{ReCl}(\text{CO})_3(\text{N,N}'\text{-4-}((4\text{-}(\text{difenylamino})\text{fenyl})\text{karbamoyl})\text{-2,2}'\text{-bipyridin})$ a $\text{ReCl}(\text{CO})_3(\text{N,N}'\text{-5-}((4\text{-}(\text{difenylamino})\text{fenyl})\text{karbamoyl})\text{-2,2}'\text{-bipyridin})$ po excitaci ultrakrátkým laserovým pulsem v blízké UV oblasti. Konkrétně se zde zaměřujeme na přenos mezi stavem s ${}^3\text{MLCT}/{}^3\text{IL}$ charakterem a ${}^3\text{CS}$ a na vysvětlení, proč je u druhého komplexu rychlejší. Struktury komplexů v základním a ${}^3\text{MLCT}$ stavu byly získány z klasických a QM/MM MD simulací v dimetylsulfoxidu ve formě explicitního rozpouštědla. U získaných struktur byly analyzovány geometrické parametry, rozložení elektronové hustoty a vliv elektrostatického působení rozpouštědla. Ovlivnění rychlosti přenosu elektronu bylo odhadováno na základě velikosti elektronových spřažení. Ukazuje se, že vzhledem k jejich velikosti (pro GS ~ 25 meV), je průběh elektronového přenosu spíše adiabatický. Stanovené elektrostatické potenciály ukazují na důležitost vlivu rozpouštědla při stabilizaci ${}^3\text{CS}$ a ${}^3\text{MLCT}$ stavů, kdy se změny potenciálu nejvíce projevují v okolí bpy.