

Abstrakt

Fotosyntetická reakční centra mají pro fotosyntetizující organismy klíčovou roli. Právě zde totiž dochází k tzv. separaci náboje, kdy je energie excitovaného stavu elektronu využita na ionizaci molekul a uvolněný elektron se pak podílí na ustanovení transmembránového elektrochemického gradientu H^+ iontů využívaného ATP syntázami. Světlosběrné komplexy absorbují energii dopadajících fotonů a s vysokou účinností blížící se jedné ji přenášejí právě do reakčních center. Efektivita tohoto přenosu budí zájem vědců již mnoho dekad a rozvoj experimentálních metod umožnil značné porozumění jeho původu. Získané poznatky, v kombinaci s kvantově mechanickými přístupy, lze navíc využít i na ryze teoretický výzkum zahrnující detailní počítačové simulace. Vlastnosti celých molekulárních komplexů tak mohou být určeny s vysokou přesností a nezávisle na experimentech. Text této práce představuje úvod do teoretického studia fotosyntézy a shrnuje vývoj odvětví za poslední dvě dekády. Popsané hlavní teoretické přístupy a modely jsou dále prezentovány na příkladu reakčních center purpurové fotosyntetizující bakterie *Rhodobacter sphaeroides*, která představuje důležitý modelový organismus. Na tomto příkladě jsou také srovnány experimentálně i teoreticky získané hodnoty časů přenosu excitační energie.