

Pomocí metod kvantové chemie byly studovány spektrální vlastnosti reakčního centra fotosystému II (RC PS II) a vybraných fotosyntetických pigmentů. Absorpční spektra šesti monomerních jednotek RC PS II byla spočtena semiempirickými metodami a metodou DFT. Spektra monomerů dosažená semiempirickými metodami jsou posunutá do červena, naproti tomu spektra získaná pomocí metody DFT do modra od experimentálních hodnot pro chlorofyl a. Posun je způsoben použitou metodou. Dále byly semiempirickými metodami získány elektronové přechody pro vybrané části chlorofylofeofytinového komplexu RC PS II. Snahou bylo popsat změny plynoucí ze zvětšování komplexu chlorofylových molekul. Byl nalezen rozdíl spekter skupin pigmentů v aktivní a neaktivní části komplexu a červený posun spektra dimeru od spektra monomerního chlorofylu a. Spektra pigmentů (chlorofylů, bakteriochlorofylů, karotenů, fykobilínů) vypočtená na DFT úrovni jsou v kvalitativní shodě s experimentem. Byl nalezen očekávaný vliv struktury na podobu spektra. Sledovanými závislostmi byla přítomnost různých substituentů, délka chromoforu a vybrané modifikace struktury.