

Abstrakt

Extrémně rychlé relaxační procesy ve fotosyntetických molekulárních komplexech a v molekulách chlorofylu jsou pozorovány již desítky let. Vzestup multidimenzionálních spektroskopických technik s femtosekundovým časovým rozlišením vedl k objevům mnoha dosud nezaznamenaných fyzikálních jevů. Tyto ultrarychlé procesy (probíhající v an časových škálách 10^{-15} s) byly v posledních letech předmětem intenzivních diskusí a experimentálních měření, ale teoretických modelů těchto procesů je málo. V této diplomové byl zformulován a otestován nový teoretický spektroskopický model pro molekuly chlorofylu a jemu podobných. Fyzikální parametry modelu byly optimalizovány na experimentálních absorpčních spektrech získaných z literatury. Parametrisovaný model byl poté použit s velkým úspěchem k reprodukci experimentálních dat a také k simulaci dynamik populací excitovaného stavu pomocí Redfieldových rovnic, které byly odvozeny, implementovány a výpočetně optimalizovány. Relaxační časy přechodu $Q_x - Q_y$ v molekule chlorofylu *a* byly odhadnuty z nasimulovaných dynamik a porovnány s literaturou. Byla také navržena a diskutována omezení nového modelu.