

# **Závěrečná zpráva projektu specifického výzkumu na r. 2013 – zakázka 2136.**

**Název projektu:** Modelování emisních a absorpčních spekter prstencových molekulárních systémů

## **Specifikace řešitelského týmu:**

Odpovědný řešitel: Mgr. Milan Horák, IČ: 27408, K-DR-TFY

Studenti doktorského studia na PdF UHK: Mgr. Milan Horák, IČ: 27408, K-DR-TFY

Školitel doktoranda: Doc. RNDr. Pavel Heřman, Dr.

**Celková částka přidělené dotace:** 90000 Kč

## **Stručný popis postupu při řešení projektu:**

Okruh problémů řešených v tomto projektu náleží k základnímu teoretickému výzkumu optických vlastností molekulárních nanoagregátů, které hrají důležitou roli v biologických procesech a při vývoji zařízení na molekulární úrovni. K nejstudovanějším systémům tohoto typu patří pro svou relativní jednoduchost a symetrii fotosyntetické anténní systémy purpurových bakterií. Pochopení principů, kterými se řídí fotosyntetické systémy, může přispět k vývoji velmi efektivních zařízení k zachycování a přeměně světelné energie [1-3].

Některé z problémů diskutovaných v poslední době (viz návrh projektu):

### **a) vliv dynamického nepořádku – koherentní a nekoherentní režim přenosu excitonu**

K popisu vlivu interakce excitonu s fononovou lázní (dynamický nepořádek) na fyzikální vlastnosti je nutno celý systém rozdělit na dvě části – relevantní subsystém a zbytek (lázeň). Síla interakce mezi excitonem a fonony rozhoduje o tom, která část celého systému tvoří relevantní subsystém. Mimo případu čistě nekoherentního přenosu, ve kterém je možno pro popis časového vývoje pravděpodobnosti obsazení jednotlivých míst použít Pauliho řídicí rovnice (PME), je nutno používat velmi komplikované rovnice pro excitonovou matici hustoty (popř. jiné ekvivalentní metody), aby bylo možno zahrnout nejen pravděpodobnosti obsazení, ale i fázové vztahy dané nediagonálními maticovými elementy.

### **b) vliv diagonálního a nediagonálního statického nepořádku na lokalizaci (delokalizaci) elektronových stavů**

Interakce s prostředím probíhá na různých časových škálách. Pokud tato interakce probíhá na časové škále řádově mnohem delší, než odpovídá časovému vývoji relevantního subsystému, můžeme tuto interakci modelovat pomocí statického nepořádku. Existuje několik modelů statického nepořádku (nekorelovaný a korelovaný nepořádek v lok. excitačních energiích, nekorelovaný a korelovaný nepořádek v transfer integrálech související s fluktuacemi poloh jednotlivých pigmentů a orientací dipólových momentů). Přítomnost statického nepořádku má podstatný vliv na lokalizaci elektronových stavů, a tím i na optické vlastnosti.

### **c) optické vlastnosti individuálních nanosystémů – single molecule spectroscopy (SMS)**

Nepořádek v molekulárních agregátech často maskuje detaily ve stacionárních optických spektrech, zvláště při nízkých teplotách. Jedna z cest, jak eliminovat tuto komplikaci, je aplikace techniky SMS, při které jsou měřena fluorescenční excitační spektra individuálních komplexů při velice nízké teplotě.

## d) jiné typy molekulárních agregátů

Přítomnost silné intramolekulární interakce v dendrimerech a jiných větvičích se makromolekulách iniciovala výzkum přenosu energie v těchto systémech a pokusy o vývoj nových optických materiálů.

Geometrická struktura komplexu LH2 z anténního systému purpurové bakterie *Rhodospseudomonas acidophila* je známa do velkých detailů (např. [4]). Jsou známy struktury dalších bakteriálních komplexů (LH1, LH3, LH4). Tyto prstence se liší počtem pigmentů, symetrií, uspořádáním dipólových momentů, silou vazby mezi jednotlivými pigmenty atd. (např. [5]).

### Cíle projektu:

Projekt, který navázal na projekty specifického výzkumu z předchozích let 2007 – 2012, si kladl za cíl pokračovat ve studiu anténních systémů a zaměřit se především na světlosběrný komplex LH4 z purpurové bakterie *Rhodobacter sphaeroides* s osmičetnou symetrií a jiným uspořádáním (téměř radiálním) dipólových momentů a studovat stacionární fluorescenční a absorpční spektra za přítomnosti jak statického, tak dynamického nepořádku a zaměřit se na další typy statického nepořádku, které nebyly studovány v předchozích letech.

Výstupem z projektu měly být příspěvky na dvou z mezinárodních konferencí:

### Postup práce:

Za spolupráce doktoranda M. Horáka a bývalého doktoranda D. Zapletala byly provedeny výpočty fluorescenčních a absorpčních spekter pro prstencový systém LH4 (osmičetná symetrie, radiální uspořádání dipólových momentů). Do výpočtů byl zahrnut jak vliv dynamického nepořádku, tak i statického nepořádku (ten byl zahrnut jako nekorelované fluktuace lokálních excitačních energií s gausovským rozdělením).

Pro výpočty byl užit model, který užívá tzv. „full hamiltonian model“ (v hamiltoniánu jsou zahrnuty všechny členy popisující vzájemné interakce mezi bakteriochlorofyly v dipól-dipólovém přiblížení). Dynamický nepořádek (interakce s fononovou lázní) byl předpokládán lokální (tj. pouze v lokálních excitačních energiích) a zcela nekorelovaný (každý pigment má svoji vlastní fononovou lázeň nezávislou na ostatních a tyto lázně mají pro všechny pigmenty stejné vlastnosti). V našich výpočtech jsme uvažovali Kühnův model spektrální hustoty fononů. Pro výpočet absorpčního a stacionárního fluorescenčního spektra byla použita Mukamelova metoda [6,7].

Další postup prací byl bohužel zastaven velmi závažným onemocněním M. Horáka.

[1] R. van Grondelle, and V. I. Novoderezhkin, *Phys.Chem. Chem. Phys.*, 8 (2006) 793.

[2] R. J. Cogdell, A. Gall, J. Koehler, *Quarterly Reviews of Biophysics* 39 (2006) 227.

[3] H. van Amerongen, L. Valkunas, and R. van Grondelle, *Photosynthetic excitons*, World Scientific (2000).

[4] G. McDermott, S.M. Prince, A.A. Freer, A.M. Hawthornthwaite-Lawless, M.Z. Papiz, R.J. Cogdell, N.W. Issacs, *Nature* 374 (1995) 517.

[5] N. Hartigan, H.A. Tharia, F. Sweeney, A.M. Lawless, M.Z. Papiz, *Biophys. J.* 82 (2002) 963.

[6] S. Mukamel, *Principles of nonlinear optical spectroscopy*, Oxford University Press, New York, 1995.

[7] W. M. Zhang, T. Meier, V. Chernyak, S. Mukamel, *J. Chem. Phys.* 108 (1998) 7763.

### Splnění kontrolovatelných výsledků řešení:

V projektu byly plánovány jako výstupy 2 články ve sbornících z mezinárodních konferencí. Vzhledem k závažnému a dlouhodobému onemocnění řešitele vznikla reálně na základě řešení projektu pouze 1 publikace [i], a to článek ve sborníku z konference ECC 2013. (je zanesen do

OBD). Protože řešitel onemocněl těsně předtím, než měl odjet na tuto konferenci, prezentoval tam příspěvek místo něj školitel.

[i] HORÁK, M.; HEŘMAN, P.; ZAPLETAL, D. Computer Simulation of Absorption and Steady State Fluorescence Spectra of LH4 – Full Hamiltonian Model. In: *Recent Advances in Information Science, Proceedings of the 7th European Computing Conference ECC'13*, Dubrovnik, Croatia, June 25-27, 2013. WSEAS Press, 2013, p. 391 - 396.

ISBN: 978-960-474-304-9.

ISSN: 1790-5109.

#### **Hospodaření:**

Vzhledem k onemocnění doktoranda musel být projekt předčasně ukončen a prostředky nebyly zcela vyčerpány. Z prostředků na projekt byl hrazen konferenční poplatek na konferenci ECC'13 a doktorandovi byla vyplacena část prostředků určených na osobní náklady (viz výpis z Magionu).

#### **Přílohy:**

- a) kopie publikačního výstupu [i]
- b) výpis z OBD
- c) Výsledovka z ekonomického informačního systému Magion

17.12.2013

---

Výsledovka po účtech s pohyby  
Pohyby za období 2013 / 01 - 12

2136

Pracoviště:	*****	Všechny vybrané analytiky
Činnost:	****	Všechny vybrané analytiky
Fullcost:	*****	Všechny vybrané analytiky
Zakázka:	*****	Všechny zakázky
Podzakázka:	***	Všechny podzakázky

Účet	Název účtu	Má dáti	Dal	Zůstatek k 2013 / 12
512 001	Cestovné zahraniční zaměstnanci DU			
	Počáteční stav	0,00		
ZAV/0111/00315/13	20.05.2013	2 248,00	0,00 letenka - Horák	
ZAV/0124/00004/13	21.06.2013	-2 248,00	0,00 letenka - Horák	
512 001	Cestovné zahraniční zaměstnanci	0,00	0,00	0,00
512	Cestovné	0,00	0,00	0,00
518 004	Poplatky konference, semináře, kurzy DU			
	Počáteční stav	0,00		
ZAV/0116/00059/13	05.06.2013	14 179,00	0,00 konf. popl. Horák	
518 004	Poplatky konference, semináře, k	14 179,00	0,00	14 179,00
518	Ostatní služby	14 179,00	0,00	14 179,00
521 001	Mzdové náklady DU			
	Počáteční stav	0,00		
MZD/0101/00006/13	30.06.2013	700,00	0,00 Mzdy 2013/06	
521 001	Mzdové náklady DU	700,00	0,00	700,00
521 003	Mzdové náklady OON -práce DU			
	Počáteční stav	0,00		
MZD/0101/00006/13	30.06.2013	3 300,00	0,00 Mzdy 2013/06	
521 003	Mzdové náklady OON -práce DU	3 300,00	0,00	3 300,00
521	Mzdové náklady	4 000,00	0,00	4 000,00
524 001	Zákonné zdravotní pojištění DU			
	Počáteční stav	0,00		
MZD/0101/00006/13	30.06.2013	63,00	0,00 Mzdy 2013/06	
524 001	Zákonné zdravotní pojištění DU	63,00	0,00	63,00
524 002	Zákonné sociální pojištění DU			
	Počáteční stav	0,00		
MZD/0101/00006/13	30.06.2013	175,00	0,00 Mzdy 2013/06	
524 002	Zákonné sociální pojištění DU	175,00	0,00	175,00
524 003	Zákonné pojištění úrazové			
	Počáteční stav	0,00		
MZD/0102/00002/13	30.06.2013	3,00	0,00 Zák. pojištění 2013/06	
524 003	Zákonné pojištění úrazové	3,00	0,00	3,00
524	Zákonné sociální pojištění	241,00	0,00	241,00

Výsledovka po účtech s pohyby  
Pohyby za období 2013 / 01 - 12

Pracoviště:	Činnost:	Fullcost:	Zakázka:	Podzakázka:	Všechny vybrané analytiky	Všechny vybrané analytiky	Všechny vybrané analytiky	Všechny zakázky	Všechny podzakázky
Pracoviště:	****	Všechny vybrané analytiky							
Činnost:	****	Všechny vybrané analytiky							
Fullcost:	*****	Všechny vybrané analytiky							
Zakázka:	*****	Všechny zakázky							
Podzakázka:	***	Všechny podzakázky							
Účet	Název účtu	Má dáti	Dal	Zůstatek k 2013 / 12					
545 001	Kurzové ztráty DU								
	Počáteční stav	0,00							
	BAN/0802/10254/13 05.06.2013	277,75	0,00	0000000000 konf. popl. Ho					
				277,75					
545 001	Kurzové ztráty DU	277,75	0,00	277,75					
545	Kurzové ztráty	277,75	0,00	277,75					
	Náklady celkem	18 697,75	0,00	18 697,75					
691 006	Provoz.dotace věda MŠMTspecifický výzkum		0,00						
	Počáteční stav		18 697,75	Dotace MŠMT spec.výzkum					
	MAN/0910/00006/13 08.02.2013	0,00	18 697,75						
				18 697,75					
691 006	Provoz.dotace věda MŠMTspecifi	0,00	18 697,75	18 697,75					
691	Přijaté přis. mezi zúčt.mezi org.slož.	0,00	18 697,75	18 697,75					
	Výnosy celkem	0,00	18 697,75	18 697,75					
Hospodářský výsledek k 2013 / 12:				0,00					
Náklady za vybrané:		18 697,75		18 697,75					
Výnosy za vybrané:			18 697,75						
Hospodářský výsledek za vybrané k 2013 / 12:				0,00					
Výběrová kritéria (omezení sestavy se řídí právy uživatele noskope1 (uvedena v závorce))									
Pracoviště:	01* (01**)								
Činnost:	(**)								
Fullcost:									
Zakázka:	2136 (*)								
Podzakázka:									