

Výroční zpráva projektu specifického výzkumu v roce 2015, zakázka č. 2106

Název projektu: Modelování emisních a absorpčních spekter prstencových molekulárních systémů – vliv statického a dynamického nepořádku

Specifikace řešitelského týmu

Odpovědný řešitel: **Mgr. Milan Horák**

Studenti doktorského studia na UHK: **Mgr. Milan Horák, K-DR-FY, ID - S14FY002DK**

Studenti magisterského studia na PřF UHK:

Další výzkumní pracovníci: **Doc. RNDr. Pavel Heřman, Dr.**, Katedra fyziky PřF UHK, školitel doktoranda

Celková částka přidělené dotace: 112000,- Kč

Datum zahájení řešení projektu: 1. 4. 2015

Předpokládané datum ukončení řešení projektu: 30. 11. 2016

Stručný popis postupu při řešení projektu (max. 2 strany).

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, kdy je možno pro popis časového vývoje pravděpodobnosti obsazení jednotlivých míst použít Pauliho řídicí rovnice (PME), je nutno používat 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 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 lokálních 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 za velice nízké teploty.

d) jiné typy molekulárních agregátů

Přítomnost silné intramolekulární interakce v dendrimerech a jiných větvících 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, jejich splnění a přínos.

Projekt, který navázal na projekty specifického výzkumu z předchozích let 2007 – 2014, si kladl za cíl pokračovat ve studiu světloběrného komplexu LH2 z purpurové bakterie *Rhodospseudomonas acidophila* a světloběrného komplexu LH4 z purpurové bakterie *Rhodobacter sphaeroides* s osmičetnou symetrií a jiným uspořádáním dipólových momentů (téměř radiálním) a studovat stacionární fluorescenční a absorpční spektra za přítomnosti jak statického, tak dynamického nepořádku.

Výstupem z projektu měly být příspěvky na dvou mezinárodních konferencích, články ve sbornících z těchto konferencí, popř. článek ve sborníku z další mezinárodní konference (hrazené z jiných zdrojů), článek v časopise zařazeném v databázi Scopus - J_{sc} a článek v inaktovaném časopise - J_{imp} .

Postup práce:

Byly provedeny výpočty stacionárních fluorescenčních a absorpčních spekter pro kompletní prstencový systém LH2 (prsteneček B850 a prsteneček B800) za použití modelu interakcí pouze mezi nejbližšími sousedy, a to při současném zahrnutí dynamického nepořádku a statického nepořádku v lokálních excitačních energiích (publ. výstup [i] a [iv]). Výsledky byly porovnány s našimi výsledky z předchozích let pro jednodušší model komplexu LH2 obsahující pouze prsteneček B850. 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. Pro výpočet fluorescence a absorpce byla použita Mukamelova metoda [6,7]. Zkoumali jsme též lokalizaci excitonových stavů [iv].

Dále byla spočtena stacionární fluorescenční a absorpční spektra pro úplný prstencový systém LH2 (prsteneček B850 a prsteneček B800) pro případ „plného“ hamiltoniánu, opět se zahrnutím statického nepořádku v lokálních excitačních energiích a diagonálního dynamického nepořádku, (publikační výstupy [ii], [v]).

Zabývali jsme se též komplexem LH4, a to jak za použití jednoduššího modelu (pouze hlavní prsteneček B- α /B- β) [iii], tak se zahrnutím dalších dvou prstenců [vi]. Konference SEEP'15 se účastnil David Zapletal (spolupracovník z Univerzity Pardubice) a byla hrazena Univerzitou Pardubice.

Nejdůležitějším závěrem plynoucím z nových výsledků je to, že při zahrnutí druhého prstence (B800) v LH2 se v případě nízké teploty objevuje druhé maximum v absorpčním spektru, a to jak při použití modelu interakce mezi nejbližšími sousedy, tak při použití modelu plného hamiltoniánu.

V příštím roce by bylo dobré pokračovat ve výzkumu a rozšířit typy statického nepořádku, např. o fluktuace poloh bakteriochlorofylů i mimo rovinu prstence.

Práce na projektu byly ovlivněny tím, že studentovi doktorského studia M. Horákovi bylo v průběhu září znovu diagnostikováno velmi závažné onemocnění (leukémie), musel okamžitě nastoupit léčbu a z tohoto důvodu přerušit studium. Proto se i druhé konference zúčastnil P. Heřman (článek do sborníku byl v té době už přijat a nebyl by publikován bez účasti alespoň jednoho z autorů). Výroční zpráva byla též sepsána P. Heřmanem.

- [1] R. van Grondelle, and V. I. Novoderezhkin, *Phys.Chem. Chem. Phys.*, 8 (2006) 793.
- [2] R. J. Cogdell, A. Gall, J. Koehler, *Quartely 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. Isaacs, *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.

Na základě řešení projektu vznikly (vzniknou) tyto publikace:

a) Publikováno (zadáno do OBD s vazbou na RIV)

- [i] HEŘMAN, P., ZAPLETAL, D., HORÁK, M. Computer Simulation of Absorption and Steady State Fluorescence Spectra of LH2 Complex - B850 and B800 Ring. In *Recent Researches in Applied Informatics, Proceedings of the 6th International Conference on Applied Informatics and Computing Theory (AICT'15)*, Salerno, Italy, June 27-29, 2015, Recent Advances in Computer Engineering Series 31, WSEAS Press, 2015, pp. 41-49.
(ISSN: 1790-5109, ISBN: 978-1-61804-313-9)
- [ii] HORÁK, M., HEŘMAN, P., ZAPLETAL, D. Simulation of Emission and Absorption Spectra of Full LH2 Complex (B850 Ring and B800 Ring) - Full Hamiltonian Model. In *Advances in Computer Science, Proceedings of the 15th International Conference on Evolutionary Computing (EC '15), Proceedings of the 6th European Conference of Computer Science (ECCS '15)*, Rome, Italy, November 7-9, 2015, Recent Advances in Computer Engineering Series 35, WSEAS Press 2015, pp. 117-126.
(ISSN: 1790-5109, ISBN: 978-1-61804-344-3)
- [iii] Heřman, P., Zapletal, D., HORÁK, M. Modelling of Absorption and Fluorescence Spectra of Photosynthetic Complex. In *Proceedings of SEEP2015, 11-14 August 2015, Paisley, UK*, (ISBN: 978-1-903978-49-8)
- [iv] Heřman, P., Zapletal, D. Modeling of Absorption and Steady State Fluorescence Spectra of Full LH2 Complex (B850 - B800 Ring). *International Journal Of Mathematical Models And Methods In Applied Sciences*, Vol. 9, 2015, p. 614-623.
(ISSN: 1998-0140, článek v časopise J_{sc})

b) zasláno nebo v recenzním řízení

- [v] HEŘMAN, P., ZAPLETAL, D. Modeling of Emission and Absorption Spectra of LH2 Complex (B850 and B800 Ring) – Full Hamiltonian Model. *International Journal Of Mathematical Models And Methods In Applied Sciences*, 2016.
(ISSN: 1998-0140, článek v časopise J_{sc})

[vi] ZAPLETAL, D., HEŘMAN, P., B- α /B- α Ring from Photosynthetic Complex LH4 - Simulation of Absorption and Steady State Fluorescence Spectra. *International Journal of Modern Physics B*. (ISSN: 0217-9792, článek v impaktovaném časopise J_{imp})

Tab. 1 Sumář výstupů řešení projektu¹

Typ výstupu	Plán v žádosti o projekt	Splněno	Plán do 12/16	Poznámka (např. vyšlo, přijato, v redakčním řízení apod.)
Počet obhájených dizertačních prací	0	0		
Počet obhájených diplomových prací	0	0		
Jimp - výstup v impaktovaném časopisu	1	0	1	v recenzním řízení
Jsc – výstup v databázi Scopus	1	1	1	1x vyšlo, 1x v recenzním řízení
Jneimp – výstup v databázi ERIH				
Jrec – výstup v recenzovaném časopisu				
B – odborná kniha				
C – kapitola v odborné knize				
D – článek ve sborníku	2	3		3x vyšlo
Počet výsledků celkem	4	4	2	

Podrobné zdůvodnění výdajů a doložení dodatečných žádostí o změnu rozpočtu:

a) osobní náklady

Odměny - byla plánována odměna pro P. Heřmana. Vyplacena byla v plánované výši 2500 Kč.

Odvody na zdravotní, sociální a úrazové pojištění; tvorba sociálního fondu – vyplaceno v plánované výši

Dohody o provedení práce a dohody o pracovní činnosti – byla plánována dohoda o provedení práce pro M. Horáka. Ve výši 5500 Kč. Tato částka byla vyplacena formou stipendia (žádost o změnu rozpočtu z 9.9.2015)

b) stipendia

nebyla plánována. Na základě žádosti o změnu rozpočtu (9.9.2015) byla vyplacena částka 5500 Kč.

c) spotřební materiál

bylo plánováno 5150 Kč. Na základě žádosti o změnu rozpočtu z 12.11.2015 (nižší výdaje na cestovné a nižší výdaje na drobný hmotný majetek) byla na spotřební materiál vydána částka 14334 Kč. Za tuto částku byly nakoupeny tonery a inkoustové náplně do tiskáren – 12592 Kč a kancelářské potřeby (papíry do tiskárny, šanony, psací potřeby) – 1742 Kč.

d) drobný hmotný majetek

plánovaná částka na nákup notebooku byla 25000 Kč. Výsledná cena notebooku z výběrového řízení byla 20332 Kč. Zbylé prostředky byly na základě žádosti o změnu rozpočtu (12.11.2015) použity na spotřební materiál.

e) další náklady

nebyly plánovány. Skutečná výše těchto nákladů byla 1745,44 Kč. Tuto částku tvořily kurzové ztráty, bankovní poplatky a cestovní pojištění. Tyto náklady byly v návrhu projektu zahrnuty v částce na cestovné.

¹ V případě, že vznikly typy výsledků neuvedené v tabulce, přidejte si do ní řádky.

f) náklady nebo výdaje na služby

byla plánována částka 27000 Kč na úhradu 2 konferenčních poplatků. Skutečná čerpaná částka byla 26707,45 Kč.

g) doplňkové (režijní) náklady

nebyly plánovány ani účtovány.

h) cestovné

na pokrytí účasti na 2 mezinárodních konferencích byla plánována částka 42000 Kč a na domácí cestovné částka 4000 Kč. Skutečné náklady na účast na konferencích byly 35999 Kč a na domácí cestovné bylo vydáno 4152 Kč. Zbylé prostředky byly na základě žádosti (12.11.2015) použity na spotřební materiál.

Výsledek čerpání finančních prostředků uveďte v jednotné přehledné tabulce 2.

Tab. 2 Čerpání finančních prostředků v Kč

Položka	Plán	Žádost o změnu rozpočtu	Skutečnost
Počet členů řešitelského týmu čerpajících mzdové prostředky	2	9.9.2015	1
Počet studentů čerpajících mzdové prostředky	1	9.9.2015	0
Stipendia	0	9.9.2015	5500,-
DPP, DPČ - studenti	5500,-	9.9.2015	0
Odměny, DPP, DPČ - ostatní	2500,-		2500,-
Zákonné zdravotní a sociální pojištění	850,-		860,51
Celkem osobní náklady	8850,-		8860,51
Spotřební materiál	5150,-	12.11.2015	14334,-
Drobný hmotný majetek	25000,-		20332,-
Materiálové náklady celkem	30150,-	12.11.2015	34666,-
Služby celkem	27000,-		26707,45
Cestovné celkem	46000,-	12.11.2015	40151,-
Ostatní náklady	0		1745,44
Celkové náklady	112000,-		112130,40

Přílohy:

- kopie publikačních výstupů,
- výpis z OBD – výstupy podpořené tímto projektem,
- výsledovka z ekonomického informačního systému Magion – vyúčtování dotace,
- žádosti o povolení změny rozpočtu

Datum: 4.1.2016

Podpis