

Závěrečná zpráva projektu specifického výzkumu

zakázka č. 2104

Název projektu: Modelování optických vlastností prstencových molekulárních systémů

Specifikace řešitelského týmu

Odpovědný řešitel: doc. RNDr. Pavel Heřman

Studenti doktorského studia na UHK: Mgr. Jan Loskot

Studenti magisterského studia na PŘF UHK:

Další výzkumní pracovníci:

Celková částka přidělené dotace: 75371 Kč

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

Okruh problémů 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 fotosyntetické anténní systémy purpurových bakterií, a to z důvodů relativní jednoduchosti těchto antén a jejich pravidelné geometrické struktury. Studium těchto systémů může pomoci k objasnění principů efektivního přenosu energie v těchto systémech a k lepšímu pochopení celého procesu fotosyntézy. Mohlo by též v budoucnosti přispět k vývoji syntetických anténních zařízení použitelných k efektivnímu zachycování a přenosu světelné energie.

Nejlépe prostudovanými systémy jsou periferní komplex LH2 z anténního systému purpurové bakterie *Rhodospirillum rubrum* (*Rbl.*) *acidophilus* (původní označení *Rhodospirillum rubrum* (*Rps.*) *acidophila*) [3,4] a komplex LH4 z bakterie *Rhodospirillum rubrum* (*Rbc.*) *sphaeroides* [5]. Jsou známy i struktury dalších bakteriálních komplexů (LH1 – *Rbl.* *acidophilus*, LH3 – *Rbc.* *sphaeroides*, atd.). Jednotlivé typy komplexů se liší počtem bakteriochlorofylů, symetrií (např. LH2 – devítičetná symetrie, LH4 – osmičetná symetrie), uspořádáním dipólových momentů (LH2 – tečné uspořádání vzhledem k prstenci, LH4 – radiální uspořádání), atd. Na přenos energie v těchto systémech má velký vliv prostředí (proteiny, na které jsou bakteriochlorofyly navázány atd.). Fluktuace, které probíhají na mnohem delší časové škále než přenos energie, je možno modelovat pomocí tzv. statického nepořádku, rychlé fluktuace pomocí dynamického nepořádku – interakce s fononovou lázní. Fluktuace prostředí se velice výrazně projevují i v optických vlastnostech těchto systémů.

Projekt je pokračováním projektů z let 2007 – 2017. V předchozích letech jsme se zabývali depolarizací fluorescence (časovým vývojem anizotropie fluorescence). Z porovnání výsledků simulací s experimentem jsme alespoň přibližně dostali sílu dynamického nepořádku a intervaly, v kterých by měla ležet síla statického nepořádku, a to jak pro diagonální statický nepořádek (Gaussovské fluktuace lokálních excitačních energií – diagonálních maticových elementů hamiltoniánu), tak pro nediagonální statický nepořádek (Gaussovské fluktuace nediagonálních maticových elementů hamiltoniánu). Dále jsme modelovali absorpční a stacionární fluorescenční spektra pro prstencové molekulární systémy, které by mohly být

modelem pro prstenec B850 z komplexu LH2 a prstenec B- α /B- β z komplexu LH4. Částečně jsme se též zabývali statistickými vlastnostmi příslušných hamiltoniánů.

V letošním roce jsme pokračovali v modelování optických spekter prstencových molekulárních světloběrných systémů purpurových bakterií a zkoumání statistických vlastností příslušných hamiltoniánů, rozšířili jsme naše simulace na systémy s několika prstenci.

1. modelovali jsme absorpční a stacionární fluorescenční spektra kompletního komplexu LH2, který obsahuje 2 prstence (prstenec B850 a prstenec B800), a výsledky jsme porovnali s našimi předchozími výsledky pro samostatný prstenec B850. Zabývali jsme se též lokalizací excitovaných stavů a její souvislostí se spektry.
2. Začali jsme modelovat též spektra kompletního komplexu LH4, který obsahuje 3 prstence.

Splnění cílů řešení a přínos projektu.

Jako výstupy byly plánovány dva příspěvky ve sbornících z konferencí, aktivní účast na jedné mezinárodní konferenci a dva články v časopisech zařazených v databázi Scopus - Jsc (popř. jeden článek Jsc a jeden článek v impaktovaném časopise - Jimp).

Skutečné výstupy:

1. Řešitel (P. Heřman) se zúčastnil mezinárodní konference ICAMCS2018 (International Conference on Applied Mathematics and Computer Science) v Budapešti 6.-8.10.2018, kde přednesl příspěvek s názvem „Simulation of Spectral Profiles of B850–B800 Ring from LH2 Complex“. Organizátoři uvedené konference slibovali, že sborník bude publikován v renomovaném nakladatelství (IEEE) a bude odeslán k indexaci ve Scopusu a WoS. Bohužel ani po následném dotazování u organizátorů po skončení konference jsme nedostali odpověď, kdy sborník vyjde. Po delší době jsme na jaře 2019 (jsme podepisovali „Copyright Form“ (viz příloha), ale sborník ani po tak dlouhé době zatím nevyšel.

[1] Heřman, P.; Zapletal, D.; Loskot, J.: Simulation of Spectral Profiles of B850–B800 Ring from LH2 Complex – článek byl přijat, ale zatím nevyšel

Náš předpoklad dále byl, že druhý článek ve sborníku bude z konference, které se zúčastní spolupracovník z Univerzity Pardubice. Ten však bohužel nesehnal k účasti na konferenci potřebné prostředky.

2. Na jaře 2019 vyšel v časopise International Journal of Biology and Biomedical Engineering následující článek:

[2] Heřman, P.; Zapletal, D: Light Harvesting Complex LH2 - Simulation of Spectral Profiles. International Journal of Biology and Biomedical Engineering. International Journal of Biology and Biomedical Engineering 13 (2019) 10-19.

Publikace je zadána v OBD (viz příloha).

Splnění kontrolovatelných výsledků řešení.

Tab. 1 Sumář výstupů řešení projektu

Typ výstupu	1. rok	2. rok	3. rok	Poznámka
Hodnocené výstupy projektu				
Jimp (databáze WoS)				
Jsc (databáze Scopus)	1			Vyšel na jaře 2019
B (recenzovaná odborná kniha) ^{1*}				
C (kapitola v recenzované odborné knize)*				
D (článek ve sborníku ve WoS, Scopus)	1			sborník zatím nevyšel (výsledek zatím nemohl být zadán do OBD)
P (patent)				
Počet výsledků	2			
Nehodnocené výstupy projektu				
Počet obhájených dizertačních prací				
Počet obhájených diplomových prací				
Počet výsledků	2			

Přílohy:

- a) kopie publikačního výstupu, který nebyl v definitivní podobě přiložen k průběžné zprávě,
- b) výpis z OBD

Datum: 28.11.2019


Podpis odpovědného řešitele:

* Pouze renomovaná nakladatelství Elsevier, Springer, Bentham apod.2

Export z OBD dne 26.11.2019 13:20:27

Pořadové číslo: 1/1

ID Publikace:	43875677
Stav:	Uložený
Literární forma:	J_ČLÁNEK V ODBORNÉM PERIODIKU
Rozšíření LiF:	Jsc
Titul (v originále):	Light harvesting complex LH2 - simulation of spectral profiles
Rok publikace:	2019
Autor:	Pavel Heřman (Prac.: 4430)
Autor:	David Zapletal (Prac.:)
Název zdroje:	International journal of biology and biomedical engineering
ISSN:	1998-4510
Vydavatel:	North atlantic university union
Ročník:	13
Strany:	10-19
Abstrakt orig.:	Absorption and steady state fluorescence spectra are simulated for relatively simple circular molecular system. It can be treated as a model of peripheral light harvesting complex LH2 from purple bacterium Rhodospseudomonas acidophila. Both rings (B850 ring and B800 one) are included in our model. The spectra are calculated within full Hamiltonian model and compared for two types of slow fluctuations. Gaussian fluctuations in local excitations energies and Gaussian fluctuations in positions of bacteriochlorophylls are considered. Fast fluctuations, interaction with phonon bath, is also taking into account for low and room temperature. The resulting spectra show strong dependence on temperature. Splitting of both spectra are visible at low temperature. The differences caused by static disorder type are also remarkable. Localization of exciton states contributing to the steady state fluorescence spectra is investigated by thermally averaged participation ratio.
Abstrakt čes.:	Jsou simulována absorpční a stacionární fluorescenční spektra pro relativně jednoduchý prstencový molekulární systém. Tem může představovat model periferního světlosběrného komplexu LH2 z purpurové bakterie Rhodospseudomonas acidophila. V modelu jsou zahrnuty oba prstence (prsteneček B850 i prsteneček B800). Spektra jsou počítána za použití modelu plného hamiltoniánu a porovnávána pro dva typy fluktuací, a to Gausovské fluktuace lokálních excitačních energií a Gausovské fluktuace poloh jednotlivých bakteriochlorofylů. Jsou zahrnuty též rychlé fluktuace, interakce s fononovou lázní, při nízké a pokojové teplotě. Výsledná spektra ukazují silnou závislost na teplotě. Při nízké teplotě je viditelné rozštěpení obou spekter. Za zmínku stojí také rozdíly způsobené typem statického nepořádku. Je vyšetřována též lokalizace excitonových stavů přispívajících ke stacionárnímu fluorescenčnímu spektru.
Abstrakt angl.:	Absorption and steady state fluorescence spectra are simulated for relatively simple circular molecular system. It can be treated as a model of peripheral light harvesting complex LH2 from purple bacterium Rhodospseudomonas acidophila. Both rings (B850 ring and B800 one) are included in our model. The spectra are calculated within full Hamiltonian model and compared for two types of slow fluctuations. Gaussian fluctuations in local excitations energies and Gaussian fluctuations in positions of bacteriochlorophylls are considered. Fast fluctuations, interaction with phonon bath, is also taking into account for low and room temperature. The resulting spectra show strong dependence on temperature. Splitting of both spectra are visible at low temperature. The differences caused by static disorder type are also remarkable. Localization of exciton states contributing to the steady state fluorescence spectra is investigated by thermally averaged participation ratio.
Počet stran:	10
Odkazy:	http://www.naun.org/cms.action?id=20229
Hlavní klíč:	LH2; B800 ring; B850 ring; absorption and fluorescence spectrum; static and dynamic disorder; exciton states; localization
Vedlejší klíč:	LH2; prsteneček B800; prsteneček B850; absorpční a fluorescenční spektrum; statický a dynamický nepořádek; excitonové stavy; lokalizace
Jazyk (originál):	angličtina (eng)
Titul česky:	Světlosběrný komplex LH2 - simulace spektrálních profilů
Titul anglicky:	Light harvesting complex LH2 - simulation of spectral profiles
Datum vložení:	26.11.2019
Financování:	S -