

Závěrečná zpráva projektu specifického výzkumu – zakázka 2110.

Název projektu: Optické vlastnosti a transport energie v prstencových molekulárních systémech

Specifikace řešitelského týmu:

Odpovědný řešitel: doc. RNDr. Pavel Heřman, Dr.

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: 54000 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 větvcích 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 2006 – 2012, si kladl za cíl pokračovat ve studiu světloměrného komplexu LH2 z purpurové bakterie *Rhodospseudomonas acidophila* a světlosběrného komplexu 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.

Výstupem z projektu měl být příspěvek jedné z následujících mezinárodních konferencí:

- The 10th International Conference on Excitonic processes in Condensed Matter, Nanostructured and Molecular Materials, July 1-6, Groningen, the Netherlands
- The 6th EUROPEAN COMPUTING CONFERENCE (ECC '12), Prague, Czech Republic, September 24-26, 2012
- 14th WSEAS International Conference on MATHEMATICAL & COMPUTATIONAL METHODS in SCIENCE & ENGINEERING (MACMESE '12), Malta, September 7-9, 2012
- The 10th International Conference on Excitonic processes in Condensed Matter, Nanostructured and Molecular Materials, July 1-6, Groningen, the Netherlands
- Conference on Computational Physics (CCP2012), October 14-18, 2012, Kobe, Japan
- The 2nd International Conference on Advanced Communications and Computation - INFOCOMP 2012, October 21 - 26, 2012, Venice, Italy
- European Conference of Computer Science (ECCS '12), Paris, France, December 2-4, 2012, popřípadě na jiné vhodné konferenci, pokud se taková objeví.

Postup práce:

Za spolupráce doktoranda M. Horáka a bývalého doktoranda D. Zapletala byly provedeny výpočty fluorescenčních a absorpčních spekter pro prstencový systém LH2, a to za přítomnosti jak dynamického, tak statického nepořádku (publikační výstup [i]). Pro výpočty použit „plný“ hamiltonián (jsou v něm obsaženy interakce mezi všemi molekulami) a výsledky byly porovnány s našimi výsledky z předchozích let, kde byl použit zjednodušený model s interakcemi pouze mezi nejbližšími sousedy. 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. Statický nepořádek byl též uvažován lokální, tj. Gausovský nepořádek v lokálních excitačních energiích, a zcela nekorelovaný. Pro výpočet fluorescence a absorpce byla použita Mukamelova metoda [6,7].

Dále byla spočtena fluorescenční a absorpční spektra pro prstencový systém LH4 (osmičetná symetrie, radiální uspořádání dipólových momentů), opět se zahrnutím jak dynamického, tak statického nepořádku (publikační výstup [ii]).

V těchto výpočtech byly použity dva typy nekorelovaného statického nepořádku:

- a) Gausovský nepořádek v lokálních excitačních energiích,
- b) Gausovský nepořádek v transfer integrálech (interakčních energiích molekul),

Dále jsme se zabývali lokalizací a delokalizací excitonových stavů a souvislostí s tvarem a polohou spektra (publikační výstupy [iii]).

- [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 byl plánován jako výstup článek v impaktovaném časopise, v případě nepřijetí článek ve sborníku z některé z dalších konferencí uvedených výše. Reálně vznikly na základě řešení projektu 3 publikace (článek v EPJ [ii] je v recenzním řízení, článek ve sborníku [i] je již publikován a je zadán v OBD, a článek v IJMCS [iii] byl zaslán do redakce na konci prosince.

[i] HEŘMAN, P.; ZAPLETAL, D.; HORÁK, M. Emission spectra of LH2 complex: full hamiltonian model. *European Physical Journal*, zasláno, v recenzním řízení.
 ISSN: 1742-6588 (Print), 1742-6596 (Online).

[ii] HEŘMAN, P.; ZAPLETAL, D. Computer simulation of spectra for molecular ring: LH4 - different types of static disorder. In *Recent Advances in Information Science, Proceeding of the 3rd European Conference of Computer Science (ECCS'12)*. Paris, France, December 2-4, 2012. WSEAS Press, 2012, p. 79 -84.
 ISBN: 978-1-61804-140-1, ISSN: 1790-5109.

[iii] HEŘMAN, P.; ZAPLETAL, D. Intermolecular coupling fluctuation effect on absorption and emission spectra for LH4 ring. *International Journal of Mathematics and Computers in Simulations*, 2012, zasláno, v recenzním řízení.
 ISSN: 1998-0159.

Typ výstupu	Plán	Skutečnost	Poznámka (např. vyšlo, přijato, v redakčním řízení apod.
Počet členů řešitelského týmu čerpajících mzdové prostředky	1	1	
Z toho studenti	1	1	
Počet dizertačních prací	0	0	
Počet diplomových prací	0	0	
Zařazeno do kategorie excelence			
Jimp - výstup v impaktovaném časopisu	1	1	v recenzním řízení
J – ostatní odborná periodika	1	1	(Scopus) v recenzním řízení
B – odborná kniha	0	0	
C – kapitola v odborné knize	0	0	
D – článek ve sborníku	1	1	Vyšlo
F – užitný vzor aj.	0	0	

Hospodaření:

Položka	Plán	Skutečnost
Stipendia	0	0
Odměny a DPP, DPČ	6000	6000
Zákonné zdravotní a sociální pojištění	0	1525
Celkem osobní náklady	6000	7525
Spotřeba materiálu celkem	8000	9748
Drobný hmotný a nehmotný majetek	0	0
Služby celkem	14000	14741,14
Cestovné celkem	26000	22014,29
Celkové náklady	54000	54028,43

Rozpočet projektu byl přečerpán cca 20 Kč.

Podrobný rozpočet výdajů:

a) osobní náklady a jejich stručné zdůvodnění

odměna pro studenta (dohoda o provedení práce s odvody) 7500,- Kč

Odměna byla vyplacena studentovi, podílejícímu se na projektu – M. Horákovi.

b) stipendia a jejich stručné zdůvodnění - nebyla plánována ani vyplácena

c) materiálové náklady a jejich stručné zdůvodnění

datový kabel 149,- Kč

kancelářský materiál 4100,- Kč

náplně do barevné laserové tiskárny 5499,- Kč

Materiálové náklady celkem 9748,- Kč

Materiálové náklady zahrnují tonery do barevné laserové tiskárny, kancelářský materiál.

d) další náklady a jejich stručné zdůvodnění

konferenční poplatek EXCON2012 13541,- Kč

tisk posteru 480,- Kč

kurzové ztráty, zisky a haléřové vyrovnání 720,14 Kč

Další náklady celkem 14741,14 Kč

Další náklady souvisejí s účastí na konferenci EXCON2012 (konferenční poplatek), tisk posteru a zahrnují také kurzové ztráty a haléřové vyrovnání.

Náklady na druhou konferenci, které se řešitel zúčastnil byly hrazeny z jiných prostředků.

e) náklady nebo výdaje na služby a jejich stručné zdůvodnění – nebyly plánovány ani čerpány

f) doplňkové (režijní) náklady nebo výdaje v souladu s příslušným řídicím aktem UHK - nebyly plánovány ani čerpány

g) cestovné a jeho stručné zdůvodnění

Cestovné zahraniční:

letenka Amsterdam (EXCON 2012) 6058,- Kč

ubytování Groningen 6728,29 Kč

další cestovní náklady EXCON 2012

(jízdné Amsterdam – Groningen, ubytování, diety a další výdaje) 7600,- Kč

Cestovné zahraniční celkem 20386,29 Kč

Cestovné domácí

4x Pardubice a zpět (vlastní auto) 1628,- Kč

Cestovné celkem 22014,29 Kč

Výdaje na cestovné souvisejí s účastí na konferenci EXCON2012 (letenky, ubytování, diety atd.) a s cestami řešitele ke konzultacím s D. Zapletalem (Univerzita Pardubice). Konzultace se konaly střídavě v Hradci Králové a v Pardubicích.

Přílohy:

- a) kopie publikačních výstupů [i – iii]
- b) výpis z OBD – výsledky publikační činnosti podpořené projektem
- c) Výsledovka z ekonomického informačního systému Magion – vyúčtování dotace

2.1.2013
