

Závěrečná zpráva k projektu specifického výzkumu pro r. 2010

Název: Přenos energie v prstencových molekulárních systémech – studium optických vlastností

Řešitel: Doc. RNDr. Pavel Heřman, Dr.

Zúčastnění studenti: Mgr. Jan Šlégr, IČ: 15304, student magisterského stud. programu Učitelství pro střední školy, obor fyzika - informatika, od září student doktorského stud. programu Specializace v pedagogice, teorie vzdělávání ve fyzice

Zakázka: 2107/2010

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 2006 – 2009, si kladl za cíl pokračovat ve studiu anténních systémů LH2 s devítičetnou symetrií a téměř tečným uspořádáním dipólových momentů a studovat stacionární fluorescenční spektrum za přítomnosti jak statického, tak dynamického nepořádku.

Výstupem z projektu měly být příspěvky na mezinárodních konferencích DPC 2010 a EXCON 2010 a články ve sbornících z příslušných konferencí, které budou zahrnuty v databázi Web of Science.

Postup práce:

Za spolupráce Jana Šlégra byly provedeny výpočty fluorescenčních spekter pro prstencový systém LH2 (devítičetná symetrie, tangenciální uspořádání dipólových momentů), a to za přítomnosti jak dynamického, tak statického nepořádku.

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.

Dále byly uvažovány čtyři typy nekorelovaného statického nepořádku:

- a) Gaussovský nepořádek v lokálních excitačních energiích,
- b) Gaussovský nepořádek v transfer integrálech (interakčních energiích molekul),
- c) Gaussovský nepořádek v radiálních pozicích molekul v prstenci,
- d) Gaussovský nepořádek v úhlových pozicích molekul v prstenci.

Typy nepořádku b) –d) dávají všechny nepořádek v transfer integrálech, ale každý z těchto typů má jiné rozdělení.

Pro výpočet fluorescence byla použita Mukamelova metoda [6,7].

[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. 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.

Výstupy:

Výsledky našich simulací byly prezentovány celkem ve 3 příspěvcích na 2 mezinárodních konferencích. Místo konference EXCON 2010, která se konala v Austrálii, jsme zvolili konferenci ICCMSE 2010, která se konala v Řecku:

- Heřman P., Zapletal D., Šlégr J., Comparison of emission spectra of single LH2 complex for different types of disorder. 17th International Conference on Dynamical Processes in Excited States of Solids, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, USA, June 20-25, 2010.
- Heřman P., Zapletal D., Šlégr J., Modeling of emission spectra in LH2 complex I. ICCMSE 2010 – International Conference on Computational Methods in Science and Engineering, Psalidi, Kos, Greece, 3.- 8.10.2010.
- Heřman P., Zapletal D., Modeling of emission spectra in LH2 complex II. ICCMSE 2010 – International Conference on Computational Methods in Science and Engineering, Psalidi, Kos, Greece, 3.- 8.10.2010.

Články budou publikovány ve sbornících (všechny budou zařazeny v databázích Scopus a ISI Web of Science):

- Heřman P., Zapletal D., Šlégr J., Comparison of emission spectra of single LH2 complex for different types of disorder. *Physics Procedia* – v tisku.
- Heřman P., Zapletal D., Šlégr J., Modeling of emission spectra in LH2 complex I. In: *COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCE AND ENGINEERING: Lectures Presented at the International Conference on Computational Methods in Science and Engineering 2010*. AIP Conference Proceedings – přijato.
- Heřman P., Zapletal D., Modeling of emission spectra in LH2 complex II. In: *COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCE AND ENGINEERING: Lectures Presented at the International Conference on Computational Methods in Science and Engineering 2010*. AIP Conference Proceedings – přijato.

Hospodaření:

	Plán:	Skutečnost:
Materiálové náklady	26000	28331,39
Stipendium	5000	5000,-
Další náklady	24000	21787,34
Celkem	55000	55118,73

Celkově bylo na projekt přiděleno 55000 Kč z prostředků na specifický výzkum.

Podrobné zdůvodnění:

Materiál:

-notebook s pouzdem (20490,- Kč) – byl plánován

-náplně do inkoustové tiskárny (1706,- Kč)

-kancelářské potřeby (6361,39 Kč)

Celkem 28331,39 Kč

Stipendium:

Studentovi magisterského studijního programu Janu Šlégrovi bylo vyplaceno 5000 Kč.

Další náklady:

- konferenční poplatky (konference DPC 2010 a ICCMSE 2010) a kurzové ztráty (21787,34 Kč)

Přidělené prostředky na specifický výzkum byly nepatrně přečerpány (118,73 Kč).

Změny v částkách u materiálu a dalších nákladů oproti plánu byly způsobeny tím, že konferenční poplatky byly o něco levnější, než předpokládal plán (účast na konferenci v Řecku a ne v Austrálii), a bylo tedy možno mírně navýšit částku na materiál.

3. 1. 2011

Doc. RNDr. Pavel Heřman, Dr.

Přílohy:

1. Texty článků (Manuscript_Physics Procedia_DPC'10_Herman.pdf, paper_ICCMSE_2010_16_Herman.pdf, paper_ICCMSE_2010_17_Herman.pdf)
2. Výpis z OBD (OBD.pdf)
3. Výpis z Magionu (Magion.pdf)