

Výroční zpráva projektu specifického výzkumu v roce 2016, zakázka č. 2105

Název projektu: Modelování emisních a absorpčních spekter prstencových molekulárních systémů

Specifikace řešitelského týmu:

Odpovědný řešitel: **Mgr. Pavel Kabrhel**

Studenti doktorského studia na UHK: **Mgr. Pavel Kabrhel** (K-DR-FY, ID - S1319)

Studenti magisterského studia na PřF UHK: **Jaroslav Charvát** (ID: S15FY019NP, student NMGr. studia, obor Učitelství fyziky a matematiky pro střední školy)

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

Celková částka přidělené dotace: 117750,- Kč

Datum zahájení řešení projektu: 1. 4. 2016

Předpokládané datum ukončení řešení projektu: 30. 11. 2017

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, ve kterém se pro popis časového vývoje pravděpodobnosti obsazení jednotlivých míst používají Pauliho řídicí rovnice (PME), je nutno používat velmi komplikované rovnice pro excitonovou matici hustoty (popř. jiné ekvivalentní metody), neboť na časový vývoj systému mají vliv nejen pravděpodobnosti obsazení (diagonální maticové elementy matice hustoty), ale i fázové vztahy dané nediagonálními maticovými elementy. Dosavadní publikované výsledky zahrnují diagonální exciton-fononovou vazbu.

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 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, jejich splnění a přínos.

Projekt, který navazuje na projekty specifického výzkumu z předchozích let 2007 – 2015, si kladl za cíl pokračovat ve studiu světlosběrného komplexu LH2 z purpurové bakterie *Rhodospseudomonas acidophila* a světlosběrného komplexu LH4 z purpurové bakterie *Rhodobacter sphaeroides* s osmičetnou symetrií a jiným uspořádáním dipólových momentů (téměř radiálních) 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 a dva články v časopisech zařazených v databázi Scopus - J_{sc} (popř. jeden článek J_{sc} a jeden článek v impaktovaném časopise - J_{imp}).

Postup práce:

Byly provedeny výpočty stacionárních fluorescenčních a absorpčních spekter pro prstenec B- α /B- β ze světlosběrného komplexu za použití modelu plného hamiltoniánu a dipól-dipólové interakce. Současně byl zahrnut vliv dynamického nepořádku a statického nepořádku v radiálních pozicích molekul v rovině prstence (publ. výstup [i] a [iii]). Výsledky byly porovnány s našimi výsledky z předchozích let, které byly spočteny za použití modelu interakce 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. Pro výpočet fluorescence a absorpce byla použita Mukamelova metoda [6,7]. Dále byly zkoumány statistické vlastnosti hamiltoniánu pro modelový systém, konkrétně vlastnosti distribucí transferintegrálů mezi nejbližšími sousedy v prstenci B850 ze světlosběrného komplexu LH2 pro různé typy statického nepořádku svázané s fluktuacemi geometrie prstence (publikační výstupy [ii], [iv], [v]).

Nejdůležitějším závěrem plynoucím z nových výsledků je to, že rozštěpení fluorescenčního spektra má různé příčiny pro různé typy LH komplexů. V prstenci B850 z LH2 vznikne rozštěpení nahrazením modelu interakce mezi nejbližšími sousedy modelem plného hamiltoniánu a téměř nezávisí na typu statického nepořádku. V B- α /B- β prstenci z LH4

naproti tomu rozštěpení fluorescenčního spektra silně závisí na typu statického nepořádku a objevuje se jak pro NN model, tak pro FH model.

V příštím roce by bylo dobré pokračovat ve výzkumu a zabývat se statistickými vlastnostmi hamiltoniánu podrobněji, a to při zahrnutí různých typů statického nepořádku.

- [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., KABRHEL, P. Simulation of Absorption and Steady State Fluorescence Spectra, B- α /B- β Ring from Photosynthetic Complex LH4. *International Journal of Biochemistry Research*, Vol. 1, 2016, pp. 17-26.
(ISSN: 1790-5109, místo ve sborníku byl příspěvek z conference publikován v časopise)
- [ii] HEŘMAN, P., ZAPLETAL, D., CHARVÁT, J. B850 Ring from Photosynthetic Complex LH2 – Influence of Static Disorder. *International Journal of Biochemistry Research*, Vol. 1, 2016, pp. 27-34.
(ISSN: 1790-5109, místo ve sborníku byl příspěvek z conference publikován v časopise)
- [iii] HEŘMAN, P., ZAPLETAL, D. B- α /B- β Ring from Photosynthetic Complex LH4, Modeling of Absorption and Fluorescence Spectra. *International Journal Of Mathematics and Computers in Simulation*, Vol. 10, 2016, p. 332-344.
(ISSN: 1998-0159, článek v časopise Jsc)
- [iv] HEŘMAN, P., ZAPLETAL, D., B850 Ring from Photosynthetic Complex LH2 – Comparison of Different Static Disorder Types. *International Journal Of Mathematics and Computers in Simulation*, Vol. 10, 2016, p. 361-369.
(ISSN: 1998-0159, článek v časopise Jsc)

b) přijato k publikaci (zatím nepublikováno)

- [v] HEŘMAN, P., ZAPLETAL, D. Fluctuations of Bacteriochlorophyll's Positions in B850 Ring from Photosynthetic Complex LH2. *International Journal Of Mathematics and Computers in Simulation*, přijato.
(ISSN: 1998-0159, článek v časopise Jsc)

Tab. 1 Sumář výstupů řešení projektu¹

Typ výstupu	Plán v žádosti o projekt	Splněno	Plán do konce projektu	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	0 (1)	0	0	
Jsc – výstup v databázi Scopus	2 (1)	2	1	2x vyšlo, 1x přijato
Jneimp – výstup v databázi ERIH				
Jrec – výstup v recenzovaném časopisu				
B – odborná kniha				
C – kapitola v odborné knize				
D – článek ve sborníku	2	0		místo ve sbornících byly příspěvky publikovány v časopise (viz další řádek)
článek v odb. časopise (zatím není v databázi Scopus ani WOS)	0	2		
Počet výsledků celkem	4	4	1	

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.

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

b) stipendia

bylo plánováno stipendium pro P. Kabrhela ve výši 10000 Kč a stipendium pro J. Charvátu ve výši 5000 Kč - vyplaceno podle plánu

c) spotřební materiál

bylo plánováno 8400 Kč, nakoupeny byly tonery do laserové tiskárny – 5199 Kč. Zbytek prostředků byl použit na pokrytí zvýšených nákladů na služby a dalších nákladů (žádost z 31.10.2016).

d) drobný hmotný majetek

nákup nebyl plánován ani uskutečněn

e) další náklady

nebyly plánovány. Skutečná výše těchto nákladů byla 2345,29 Kč. Tuto částku tvořily kurzové ztráty, bankovní poplatky a cestovní pojištění. Tyto náklady byly v návrhu projektu zahrnuty částečně v částce na cestovné, částečně v poplatku za publikování článku.

f) náklady nebo výdaje na služby

byla plánována částka 43000 Kč na úhradu 2 konferenčních poplatků a jednoho poplatku za publikaci článku. Částka byla čerpána podle plánu, ale v návrhu projektu nebylo

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

počítáno s DPH, proto se vyčerpaná částka zvýšila na 46096,20 Kč.. O změnu rozpočtu bylo požádáno (viz žádost z 31.10.2016)

g) doplňkové (režijní) náklady

nebyly plánovány ani účtovány

h) cestovné

na pokrytí účasti na 2 mezinárodních konferencích byla plánována částka 44000 Kč a na domácí cestovné částka 4000 Kč. Skutečné náklady na účast na dvou konferencích (AICT'16, Ischia, Itálie a MMES '16, Dubrovník, Chorvatsko) byly 40026 Kč a na domácí cestovné bylo vydáno 5865 Kč. Přerozdělení mezi zahraničním a domácím cestovním bylo povoleno na základě žádosti ze 4.9.2016. O možnost použití části zbylých prostředků na pokrytí dalších nákladů a zvýšených nákladů na služby bylo též požádáno (žádost z 31.10.2016).

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	1		1
Počet studentů čerpajících mzdové prostředky	2		1
Stipendia	15000,-		15000,-
DPP, DPČ - studenti	0		0
Odměny, DPP, DPČ – ostatní	2500,-		2500,-
Zákonné zdravotní a sociální pojištění	850,-		860,54
Celkem osobní náklady	8850,-		18360,54
Spotřební materiál	8400,-	31.10.2016	5199,-
Drobný hmotný majetek	0		0
Materiálové náklady celkem	8400,-	31.10.2016	5199,-
Služby celkem	43000,-	31.10.2016	46096,20
Cestovné celkem	48000,-	4.9.2016 a 31.10.2016	45891,-
Ostatní náklady	0	31.10.2016	2345,29
Celkové náklady	117750,-		117892,03

Přílohy:

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

Datum: 6.1.2016

Podpis:

