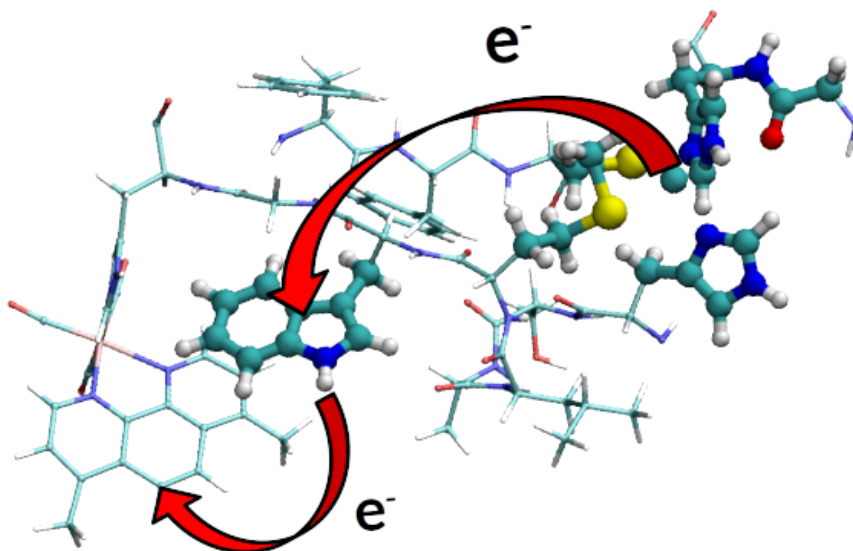


Modelování donor-akceptorových systémů spojených s vývojem fotokatalyzátorů

Vedoucí: **Mgr. Filip Šebesta, Ph.D.** (filip.sebesta@mff.cuni.cz)
Pracoviště: **Katedra chemické fyziky a optiky**

Velký cíl současné doby představuje připravení systému, který by byl schopen dostatečně efektivní umělé fotosyntézy za účelem získávání energie ze slunečního záření či záchytu CO_2 a jeho následné redukce. Inspirace se obecně hledá v živých organismech. V proteinech je elektron typicky přenášen mezi redoxními centry na vzdálenosti 10 - 20 Å a je usnadněn přítomností aromatických amino kyselin. Pomocí mutací v proteinu (záměny amino kyselin) lze vytvořit i umělé dráhy pro přenos elektronu (viz 1) a studovat vliv změn na jeho průběh. [1,2]. Takto lze stanovit důležité parametry ovlivňující separaci náboje. Pro detailní studium charakteristik přenosu elektronu však proteiny představují příliš komplexní systémy, a proto byly syntetizovány malé donor-akceptorové komplexy inspirované uspořádáním redoxních center v azurinových proteinech. Na základě fluorescenčních měření a časově rozlišené infračervené spektroskopie byly pro tyto komplexy určeny doby života excitovaných stavů, na jejichž základě ale nelze vysvětlit rozdíly v přenosu elektronu pro jednotlivé komplexy.

V interpretaci naměřených výsledků dokáží ale pomocí molekulární simulace, jež poskytují vhled do geometrického uspořádání molekul. Kvantově-chemické výpočty navíc umožňují stanovit parametry pro odhad rychlosti přenosu elektronu z Marcusovy teorie. Tyto veličiny však závisí na uspořádání molekuly i okolí, které se budou studovat v rámci projektu. Vyzkoušíte si tedy hledání stabilních konformací pro vybraný rheniový donor-akceptorový komplex nebo modelování časového vývoje systému na atomové úrovni pomocí klasické dynamiky. U stanovených struktur lze určit korelace mezi geometrickým uspořádáním (nebo elektrostatickým působením částí systému) a teoreticky určenými parametry ovlivňujícími rychlost přenosu elektronu, přičemž získané poznatky by mohly být využity při syntéze nových donor-akceptorových komplexů. Možnou variantou je i vyhodnocování časově rozlišených infračervených spekter ve spolupráci s kolegy z Heyrovského ústavu. V případě zájmu pište na adresu filip.sebesta@mff.cuni.cz a můžeme probrat podrobnosti.



Obrázek 1: Přenos elektronu v modifikovaném azurinovém proteinu

Reference

- [1] Martin Melčák, Filip Šebesta, Jan Heyda, Harry B. Gray, Stanislav Záliš, and Antonín Vlček. Tryptophan to tryptophan hole hopping in an azurin construct. *The Journal of Physical Chemistry B*, 128(1):96–108, 2024. PMID: 38145895.
- [2] Stanislav Záliš, Jan Heyda, Filip Šebesta, Jay R. Winkler, Harry B. Gray, and Antonín Vlček. Photoinduced hole hopping through tryptophans in proteins. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 118(11):e2024627118, 2021.