

Modelování přenosu elektronu pro vývoj nových fotokatalyzátorů

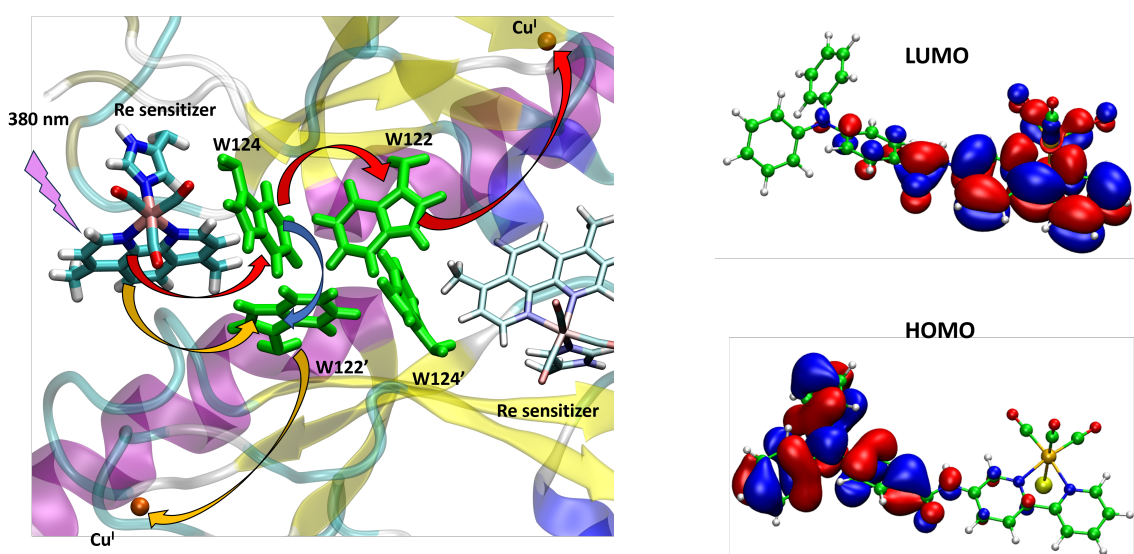
Vedoucí: Mgr. Filip Šebesta, Ph.D. (filip.sebesta@matfyz.cuni.cz)

Katedra chemické fyziky a optiky

V dnešní době se vynakládá velké úsilí na vývoj efektivních systémů vhodných pro umělou fotosyntézu. První krok mechanismu zde představuje rychlá separace náboje a vznik odpovídajících stabilních elektronových stavů. Základní charakterizace souvisejícího přenosu elektronu (PE) se provádí pomocí spektroskopických technik, které jsou ale doplňovány molekulárními simulacemi pro detailní popis na atomární úrovni, kdy se snažíme nalézt podmínky vedoucí k PE nebo naopak, které ho zpomalují. Pro modelování tohoto procesu se využívá kombinace molekulárních dynamik založených na integraci Newtonových pohybových rovnicích a přesných kvantově-mechanických výpočtů, které umožňují určit rozložení náboje nebo parametry pro odhad rychlosti PE.

V rámci projektů nabízím dvě témata. První je zaměřeno na popis rozpouštědla v okolí aktivní (části) molekuly, na níž dochází k separaci náboje. V běžných dynamických simulacích se totiž atomové náboje na molekulách rozpouštědla nemění s časovým vývojem, což ale může ovlivnit popis PE. Tento přístup bude proto porovnán s modely umožňujícími polarizaci molekul. Po provedení simulací bude srovnán vliv zvolených modelů na konformaci molekuly a elektrostatický potenciál na jejím povrchu. Druhým tématem je modelování absorpčních spekter studovaných molekul, kdy se budeme snažit nalézt mezi několika dostupnými metodami pro výpočet excitovaných stavů tu, která by umožňovala co nejlépe reprodukovat naměřená experimentální spektra. Takový model bude vhodný i pro popis samotného PE. Studie budou provedeny pro Re donorové-akceptorové systémy syntetizované v posledních letech nebo části modifikovaných proteinů (viz Obr. 1), které s kolegy z Heyrovského ústavu zkoumáme.[1,2]

Obecně se jedná o výpočetní projekty s použitím naprogramovaných metod, kdy si vyzkoušíte modelování časového vývoje kovových komplexů v rozpouštědle nebo zjistíte, jak přesně lze simulovat jejich absorpční spektra pomocí různých modelů. V případě zájmu mi pište na filip.sebesta@matfyz.cuni.cz.



Obrázek 1: Příklady studovaných systémů

1. Záliš, S. et al *PNAS* 118(11):e2024627118, 2021.
2. Melčák, M. et al *J. Phys. Chem. B* 128(1):96–108, 2024.

