

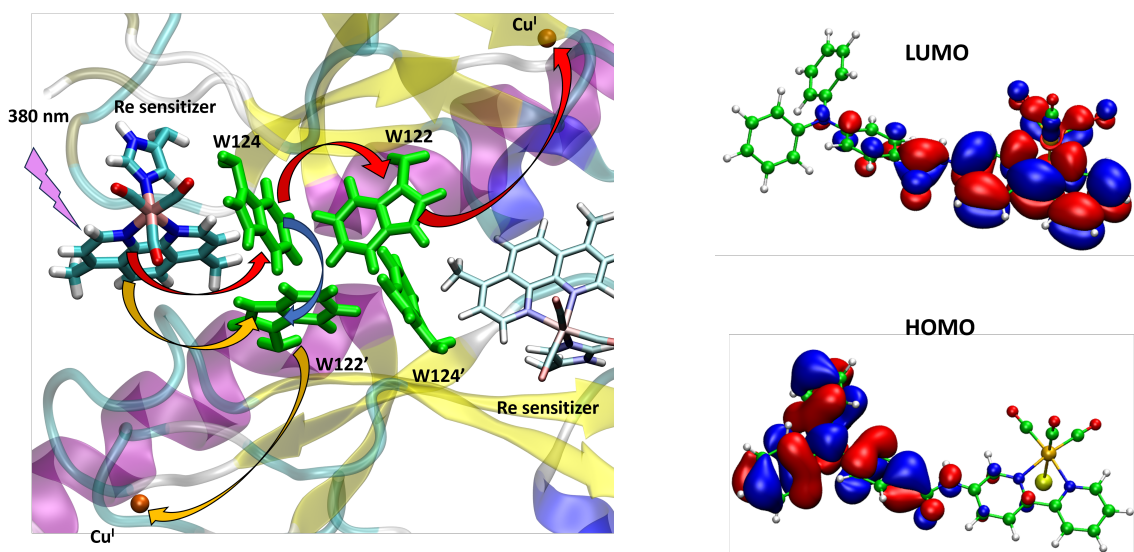
Modelování přenosu elektronu pro vývoj nových fotokatalyzátorů

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 týkající se molekulového modelování. První je zaměřeno na popis okolí aktivní (části) molekuly, na níž dochází k separaci náboje a která je zahrnuta do oblasti popisované kvantovou mechanikou. Okolí je totiž běžně modelováno pomocí klasických silových polí, v nichž se atomové náboje na molekulách nemění během časového vývoje, což ale může ovlivnit popis PE. V rámci projektu proto bude zkoumán vliv velikosti kvantové části na elektrostatické potenciály v aktivních částech a elektronická spřažení mezi nimi. Výsledky budou nakonec porovnány s modely umožňujícími polarizaci molekul okolí. 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 samotný popis PE. Studie bude provedena pro zvolený Re donorový-akceptorový komplex syntetizovaný v posledních letech nebo vybranou část modifikovaných proteinů (viz Obr. 1), které s kolegy z Heyrovského ústavu zkoumáme.[1,2,3]

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.
3. Melčák, M. et al *J. Phys. Chem. B* 130:1503-1514, 2026.