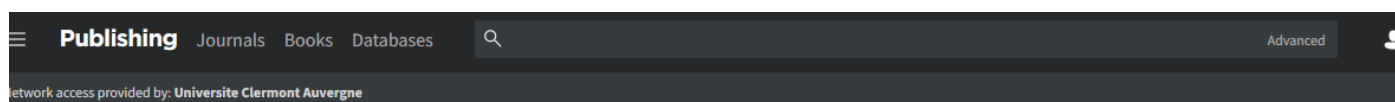




La Royal Society of Chemistry publie 45 revues évaluées par des pairs, environ 2 000 titres de livres et une collection de bases de données en ligne.



The Royal Society of Chemistry's

## Journals, Books and Databases

### Our journals

[View all journals](#)



### About our publications

The Royal Society of Chemistry publishes 45 per around 2,000 book titles and a collection of onli updating services.

Our international publishing portfolio covers th including related fields such as biologv. biophys

Utilisez la barre de recherche pour entrer vos mots-clés. Cliquez sur « advanced » pour utiliser la recherche avancée.



La recherche avancée permet de sélectionner le type de document souhaité : livre ou article. Elle permet également de filtrer la recherche grâce aux opérateurs booléens, au nom d'auteur, au DOI et à la date de publication.

SEARCH FOR \_\_\_\_\_

All RSC Content    Journal Articles    Book Chapters

FULL TEXT \_\_\_\_\_

with all of the words

with at least one of the words

with the exact phrase

without the words

REFERENCE SECTION \_\_\_\_\_

Include Reference  
 Exclude Reference (default)

AUTHOR(S) \_\_\_\_\_

Family Name

Given Name

[Add Author](#)

La recherche lancée, la page des résultats s'affichent. Vous pouvez filtrer cette liste de résultats par nom d'auteur, tranche de publication, revue/livre.

Dans les filtres, il faut sélectionner « open access » pour pouvoir lire le texte intégral



La notice du document :

Issue 15, 2020



From the journal:  
**Physical Chemistry Chemical Physics**

**Charge separation and successive reconfigurations of electronic and protonic states in a water-splitting catalytic cycle with the  $Mn_4CaO_5$  cluster. On the mechanism of water splitting in PSII†**

Kentaro Yamamoto \* and Kazuo Takatsuka \*<sup>†</sup>

[Author affiliations](#)

[Previous Article](#)   [Next Article](#)

[Check for updates](#)

**Abstract**

Much insight into the basic mechanisms of photoexcited and collision-induced ground-state water splitting has been accumulated in our nonadiabatic electron wavepacket dynamics studies based on a building-block approach reaching up to systems of binuclear Mn oxo complexes. We here extend the study to a ground-state water-splitting catalytic cycle with tetranuclear Mn oxo complex  $Mn_4CaO_5$ , or  $Mn_3Ca(H_2O)_2(OH)_4-OH-Mn^{(IV)}(H_2O)_2$ , where  $Mn_3Ca(H_2O)_2(OH)_4$  is fixed to a skewed cubic structure by  $\mu$ -hydroxo bridges and is tied to the terminal group  $Mn^{(IV)}(H_2O)_2$ . We show using the method of real-time nonadiabatic electron wavepacket dynamics that four charge separation steps always take place only through the terminal group  $Mn^{(IV)}(H_2O)_2$  alone, thereby producing 4 electrons and 4 protons which are transported to the acceptors. Each of the three charge separation steps is followed by a reloading process from the skewed cubic structure, by which electrons and protons are refilled to the vacant terminal

About   **Cited by**   Related

**Download this article**  
PDF format 

Article HTML

**Supplementary files**

Supplementary information  
PDF (246K)

**Article information**

<https://doi.org/10.1039/DOCP00443J>

<b>Submitted</b>	27 Jan 2020
<b>Accepted</b>	09 Mar 2020
<b>First published</b>	30 Mar 2020

 **This article is Open Access** 

Certaines informations sont importantes pour la bibliographie :

- **nom et numéro de la revue**
- **titre et auteurs de l'article**
- **date de publication**
- **DOI**

L'article est disponible à la lecture sur le web ou en format PDF.

Des formats de citation sont également disponibles pour l'export.

---

<b>Citation</b>	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> , 2020, <b>22</b> , 7912-7934
	<input type="text" value="BibTex"/> <input type="button" value="Go"/>
<b>Article type</b>	Paper
<b>Permissions</b>	<a href="#">Request permissions</a>