

# Průběžná výroční zpráva projektu specifického výzkumu

## zakázka č. 2104

**Název projektu:** Modelování optických vlastností prstencových molekulárních systémů

### Specifikace řešitelského týmu

Odpovědný řešitel: doc. RNDr. Pavel Heřman

Studenti doktorského studia na UHK: Mgr. Jan Loskot

Studenti magisterského studia na PŘF UHK:

Další výzkumní pracovníci:

**Celková částka přidělené dotace: 75371 Kč**

**Stručný popis postupu při řešení projektu (max. 2 strany).**

Okruh problémů 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 fotosyntetické anténní systémy purpurových bakterií, a to z důvodů relativní jednoduchosti těchto antén a jejich pravidelné geometrické struktury. Studium těchto systémů může pomoci k objasnění principů efektivního přenosu energie v těchto systémech a k lepšímu pochopení celého procesu fotosyntézy. Mohlo by též v budoucnosti přispět k vývoji syntetických anténních zařízení použitelných k efektivnímu zachycování a přenosu světelné energie.

Nejlépe prostudovanými systémy jsou periferní komplex LH2 z anténního systému purpurové bakterie *Rhodospirillum rubrum* (Rbl.) *acidophilus* (původní označení *Rhodospirillum rubrum* (Rps.) *acidophila*) [3,4] a komplex LH4 z bakterie *Rhodobacter sphaeroides* (Rbc.) *sphaeroides* [5]. Jsou známy i struktury dalších bakteriálních komplexů (LH1 – Rbl. *acidophilus*, LH3 – Rbc. *sphaeroides*, atd.). Jednotlivé typy komplexů se liší počtem bakteriochlorofylů, symetrií (např. LH2 – devítičetná symetrie, LH4 – osmičetná symetrie), uspořádáním dipólových momentů (LH2 – tečné uspořádání vzhledem k prstenci, LH4 – radiální uspořádání), atd. Na přenos energie v těchto systémech má velký vliv prostředí (proteiny, na které jsou bakteriochlorofyly navázány atd.). Fluktuace, které probíhají na mnohem delší časové škále než přenos energie, je možno modelovat pomocí tzv. statického nepořádku, rychlé fluktuace pomocí dynamického nepořádku – interakce s fononovou lázní. Fluktuace prostředí se velice výrazně projevují i v optických vlastnostech těchto systémů.

Projekt je pokračováním projektů z let 2007 – 2017. V předchozích letech jsme se zabývali depolarizací fluorescence (časovým vývojem anizotropie fluorescence). Z porovnání výsledků simulací s experimentem jsme alespoň přibližně dostali sílu dynamického nepořádku a intervaly, v kterých by měla ležet síla statického nepořádku, a to jak pro diagonální statický nepořádek (Gaussovské fluktuace lokálních excitačních energií – diagonálních maticových elementů hamiltoniánu), tak pro nediagonální statický nepořádek (Gaussovské fluktuace nediagonálních maticových elementů hamiltoniánu). Dále jsme modelovali absorpční a stacionární fluorescenční spektra pro prstencové molekulární systémy, které by mohly být

modelem pro prstenec B850 z komplexu LH2 a prstenec B- $\alpha$ /B- $\beta$  z komplexu LH4. Částečně jsme se též zabývali statistickými vlastnostmi příslušných hamiltoniánů.

V letošním roce jsme pokračovali v modelování optických spekter prstencových molekulárních světlosběrných systémů purpurových bakterií a zkoumání statistických vlastností příslušných hamiltoniánů, rozšířili jsme naše simulace na systémy s několika prstenci.

1. modelovali jsme absorpční a stacionární fluorescenční spektra kompletního komplexu LH2, který obsahuje 2 prstence (prstenec B850 a prstenec B800), a výsledky jsme porovnali s našimi předchozími výsledky pro samostatný prstenec B850. Zabývali jsme se též lokalizací excitovaných stavů a její souvislosti se spektry.
2. Začali jsme modelovat též spektra kompletního komplexu LH4, který obsahuje 3 prstence.

### **Splnění cílů řešení a přínos projektu.**

Jako výstupy byly plánovány dva příspěvky ve sbornících z konferencí, aktivní účast na jedné mezinárodní konferenci a dva články v časopisech zařazených v databázi Scopus - Jsc (popř. jeden článek Jsc a jeden článek v impaktovaném časopise - Jimp).

#### Skutečné výstupy:

1. Řešitel (P. Heřman) se zúčastnil mezinárodní konference ICAMCS2018 (International Conference on Applied Mathematics and Computer Science) v Budapešti 6.-8.10.2018, kde přednesl příspěvek s názvem „Simulation of Spectral Profiles of B850–B800 Ring from LH2 Complex“. Organizátoři uvedené konference slibovali, že sborník bude publikován v renomovaném nakladatelství a bude odeslán k indexaci ve Scopusu a WoS. Bohužel ani po následném dotazování u organizátorů po skončení konference jsme dosud nedostali odpověď, kdy sborník vyjde. Článek ve sborníku tedy zatím nevyšel.

[1] Heřman, P.; Zapletal, D.; Loskot, J.: Simulation of Spectral Profiles of B850–B800 Ring from LH2 Complex – článek prošel recenzním řízením

Náš předpoklad dále byl, že druhý článek ve sborníku bude z konference, které se zúčastní spolupracovník z Univerzity Pardubice. Ten však bohužel nesehnal k účasti na konferenci potřebné prostředky.

2. Do časopisu International Journal od Biology and Biomedical Engineering byl odeslán následující článek, je však zatím v recenzním řízení. Předpokládáme, že bude publikován v 1. polovině roku 2019.

[2] Heřman, P.; Zapletal, D: Light Harvesting Complex LH2 - Simulation of Spectral Profiles. International Journal od Biology and Biomedical Engineering – submitted

3. V závěrečné fázi přípravy je článek

[3] Heřman, P.; Zapletal, D: Light Harvesting Complex LH4 - Simulation of Spectral Profiles.

Po dokončení bude článek během 1. pololetí 2019 zaslán do některého vhodného časopisu indexovaného v databázi Scopus (popř. WoS).

### Splnění kontrolovatelných výsledků řešení.

**Tab. 1** Sumář výstupů řešení projektu

Typ výstupu	1. rok	2. rok	3. rok	Poznámka
<b>Hodnocené výstupy projektu</b>				
Jimp (databáze WoS)				
Jsc (databáze Scopus)	1	1		v recenzním řízení, (výsledek zatím nemohl být zadán do OBD) článek je téměř hotov, bude zaslán v 1. pololetí 2019
B (recenzovaná odborná kniha) <sup>1*</sup>				
C (kapitola v recenzované odborné knize)*				
D (článek ve sborníku ve WoS, Scopus)	1			sborník zatím nevyšel (výsledek zatím nemohl být zadán do OBD)
P (patent)				
<b>Počet výsledků</b>	2			
<b>Nehodnocené výstupy projektu</b>				
Počet obhájených dizertačních prací				
Počet obhájených diplomových prací				
<b>Počet výsledků</b>	2	1		

### Výsledek čerpání rozpočtu:

#### a) Spotřeba materiálu (položka dle IS Magion č. 501):

Materiálové náklady (nutno soutěžit v rámci DNS)	Stručné zdůvodnění nákupu	Cena včetně DPH (Kč)
		<b>0,00</b>

<b>Spotřební náklady</b> (spotřební a kancelářské potřeby)	Tonery do barevné a černobílé tiskárny + další kancelářské potřeby	<b>14 443,50</b>
---	--	------------------

Byly nakoupeny tonery do jedné barevné a jedné černobílé laserové tiskárny, papíry do tiskárny a další drobné kancelářské potřeby.

#### b) Cestovné (položka dle IS Magion č. 512):

\* Pouze renomovaná nakladatelství Elsevier, Springer, Bentham apod.2

cestovné zaměstnanců a jeho stručné zdůvodnění;

titul, jméno a příjmení zaměstnance	konferenční poplatek (cca Kč)	ubytování (cca Kč)	cestovné (cca Kč)	stravné (cca Kč)	celkem (Kč)	konference (název, místo a datum konání)
Pavel Heřman	Je v Magionu zaúčtován pod položkou 518	6900,00	2250,00	2939,00	<b>12089,00</b>	ICAMCS2018, Budapešť 6.-8.10.2018

V celkových nákladech na cestovné jsou též zahrnuty náklady na dvě cesty do Prahy (MFFUK) a tři cesty do Pardubic (Univerzita Pardubice), kde by konzultován postup práce na projektu a připravovány publikace. Celková částka za tyto cesty je 4333 Kč.

**c) Ostatní služby** (položka dle IS Magion č. 518):  
náklady nebo výdaje na služby a jejich stručné zdůvodnění

Typ služby	Stručné zdůvodnění služby	Cena včetně DPH (Kč)
Konferenční poplatek ICAMCS2018	Platba konferenčního poplatku bankovním převodem	<b>12 872.50</b>
Záchrana dat	Záchrana dat z nefunkčního disku	<b>22 083.00</b>

**d) Mzdové náklady** (položka dle IS Magion č. 521):

titul, jméno a příjmení	odměna (Kč)	zdůvodnění	Celkem (Kč)
Doc.RNDr. Pavel Heřman, Dr.	2000	Za práci na projektu	<b>2000,00</b>

**e) Záonné pojištění** (položka dle IS Magion č. 524):

titul, jméno a příjmení	odvody z odměn 34,52 % (Kč)	Celkem (Kč)
Doc.RNDr. Pavel Heřman, Dr.		<b>688,40</b>

**f) Jiné ostatní náklady** (položka dle IS Magion č. 549):  
zejména **stipendia** a jejich stručné zdůvodnění

**Stipendium studentů za práci na řešení projektu**

titul, jméno a příjmení	číslo studenta/tky	typ studia (Mgr./PhD.) / studia	obor studia	bankovní spojení	stipendium (Kč)
-------------------------	--------------------	---------------------------------	-------------	------------------	-----------------

studenta/tky		ročník studia			
Jan Loskot	S16FY001DP	Ph.D.	Didaktika fyziky	2800564014/2010	<b>6500,00</b>

### Cestovní stipendia studentů

titul, jméno a příjmení studenta/tky	konferenční poplatek	ubytování	cestovné	stravné	celkem (Kč)	konference (název, místo a datum konání)
	0	0	0	0	<b>0,00</b>	

### Bankovní poplatky a cestovní pojištění

V položce 549 jsou též zaúčtovány bankovní poplatky a cestovní pojištění na zahraniční cestu – částka 290 Kč.

**g) Kurzové ztráty (položka dle IS Magion č. 545):**

Pod touto položkou je zaúčtována částka 324,50 Kč.

Výsledek čerpání finančních prostředků uveďte v jednotné přehledné tabulce 2.

**Tab. 2 Čerpání finančních prostředků v Kč**

Položka magionu	Položka	Plán Kč	Žádost o změnu	Skutečnost	Poznámka
Položka magionu	Počet členů řešitelského týmu čerpajících mzdové prostředky	1		1	
	Počet studentů čerpajících mzdové prostředky	1		1	
501	Spotřeba materiálu DHIM	4681	ano 22.10.2018	<b>14 443,50</b>	
512	Cestovné	43500	ano 22.10.2018	<b>16 422,00</b>	
518	Ostatní služby	18000	ano 22.10.2018	<b>34 955,50</b>	
521	Mzdové náklady	2000		<b>2 000,00</b>	
524	Zákonné pojištění	690		<b>688,40</b>	
549	Jiné ostatní náklady (stipendia)	6500		<b>6790,00</b>	
545	Kurzové ztráty	0		<b>324,50</b>	
	<b>Celkové náklady</b>	<b>75 371</b>		<b>75 623,90</b>	

\* V případě potřeby přidejte další řádky s položkami dle IS Magion.

**Přílohy:**

- a) kopie publikačních výstupů,
- b) výsledovka z ekonomického informačního systému Magion – vyúčtování dotace.

Zpráva neobsahuje kopii výsledků z OBD, neboť výstupy zatím nemohly být do OBD zadány.



Datum: 7.1.2019

Podpis odpovědného řešitele:

Výsledovka po účtech s pohyby  
Pohyby za období 2018 / 01 - 12

Účet	Název účtu	Má dáti	Další k 2018 / 12
Pracoviště: *****		Všechny vybrané analytiky	
Činnost: ****		Všechny vybrané analytiky	
Fullcost: *****		Všechny vybrané analytiky	
Zakázka: 2104		SPEV - Prstencové molekulární systémy	
Podzakázka: ***		Všechny podzakázky	
501 003	Spotřeba materiálu kancelářské DU		
	Počáteční stav	0.00	
	ZAV/0411/00688/18 19.11.2018	4 492.00	0.00 kancelářské potřeby,
	ZAV/0411/00791/18 10.12.2018	8 956.50	0.00 tonery
	ZAV/0411/00792/18 10.12.2018	995.00	0.00 toner
501 003	Spotřeba materiálu kancelářské DU	14 443.50	0.00 14 443.50
501	Spotřeba materiálu	14 443.50	0.00 14 443.50
512 001	Cestovné zahraniční zaměstnanci DU		
	Počáteční stav	0.00	
	CES/0402/00052/18 18.10.2018	12 089.00	0.00 Heřman,HU,Budapešť,05.10.18-09.10.18
512 001	Cestovné zahraniční zaměstnanci DU	12 089.00	0.00 12 089.00
512 002	Cestovné tuzemské zaměst DU		
	Počáteční stav	0.00	
	CES/0401/00091/18 31.05.2018	1 499.00	0.00 Heřman,CZ,,29.05.18-29.05.18
	CES/0401/00117/18 13.06.2018	443.00	0.00 Heřman,CZ,,11.06.18-11.06.18
	CES/0401/00208/18 30.10.2018	1 499.00	0.00 Heřman,CZ,,23.10.18-23.10.18
	CES/0401/00237/18 13.11.2018	443.00	0.00 Heřman,CZ,,08.11.18-08.11.18
	CES/0401/00247/18 21.11.2018	449.00	0.00 Heřman,CZ,,15.11.18-15.11.18
512 002	Cestovné tuzemské zaměst DU	4 333.00	0.00 4 333.00
512	Cestovné	16 422.00	0.00 16 422.00
518 004	Poplatky konference, semináře, kurzy DU		
	Počáteční stav	0.00	
	ZAV/0416/00025/18 28.08.2018	12 872.50	0.00 konf. popl. Heřman
518 004	Poplatky konference, semináře, kurzy DU	12 872.50	0.00 12 872.50
518 009	Služby - tisk, graf.práce DU		
	Počáteční stav	0.00	
	ZAV/0411/00484/18 18.09.2018	22 083.00	0.00 záchrana dat
518 009	Služby - tisk, graf.práce DU	22 083.00	0.00 22 083.00
518	Ostatní služby	34 955.50	0.00 34 955.50
521 001	Mzdové náklady DU		
	Počáteční stav	0.00	
	MZD/0401/00009/18 30.09.2018	2 000.00	0.00 Mzdy 2018/09
521 001	Mzdové náklady DU	2 000.00	0.00 2 000.00
521	Mzdové náklady	2 000.00	0.00 2 000.00
524 001	Zákonné zdravotní pojištění DU		
	Počáteční stav	0.00	
	MZD/0401/00009/18 30.09.2018	180.00	0.00 Mzdy 2018/09
524 001	Zákonné zdravotní pojištění DU	180.00	0.00 180.00
524 002	Zákonné sociální pojištění DU		
	Počáteční stav	0.00	
	MZD/0401/00009/18 30.09.2018	500.00	0.00 Mzdy 2018/09
524 002	Zákonné sociální pojištění DU	500.00	0.00 500.00
524 003	Zákonné pojištění úrazové		

Počáteční stav		0.00		
MZD/0402/00003/18	30.09.2018	8.40	0.00	Zák. pojištění 2018/09
524 003	Zákonné pojištění úrazové	8.40	0.00	8.40
<hr/>				
524	Zákonné sociální pojištění	688.40	0.00	688.40
545 001	Kurzové ztráty DU			
Počáteční stav		0.00		
BAN/0802/21123/18	30.08.2018	324.50	0.00	0000000000 konf. popl. Heřman
545 001	Kurzové ztráty DU	324.50	0.00	324.50
<hr/>				
545	Kurzové ztráty	324.50	0.00	324.50
549 003	Bankovní poplatky DU			
Počáteční stav		0.00		
BAN/0802/21127/18	30.08.2018	70.00	0.00	0000000000 POPLATKY FUNDS TRA
549 003	Bankovní poplatky DU	70.00	0.00	70.00
<hr/>				
549 006	Jiné ostatní náklady mimoř.stip. DU			
Počáteční stav		0.00		
BAN/0802/23308/18	01.10.2018	6 500.00	0.00	1 Loskot Jan
549 006	Jiné ostatní náklady mimoř.stip. DU	6 500.00	0.00	6 500.00
<hr/>				
549 093	Pojištění cestovní			
Počáteční stav		0.00		
ZAV/0416/00034/18	16.10.2018	220.00	0.00	Heřman Pavel
549 093	Pojištění cestovní	220.00	0.00	220.00
<hr/>				
549	Jiné ostatní náklady	6 790.00	0.00	6 790.00
<hr/>				
Náklady celkem		75 623.90	0.00	75 623.90
691 006	Provoz.dotace věda MŠMTspecifický výzkum			
Počáteční stav			0.00	
MAN/0910/00005/18	05.02.2018	0.00	75 371.00	Specifický výzkum na VŠ
691 006	Provoz.dotace věda MŠMTspecifický výzkur	0.00	75 371.00	75 371.00
<hr/>				
691	Přijaté přís. mezi zúčt.mezi org.slož.	0.00	75 371.00	75 371.00
<hr/>				
Výnosy celkem		0.00	75 371.00	75 371.00
<hr/>				
Hospodářský výsledek k 2018 / 12:				-252.90
<hr/>				
Náklady za vybrané:		75 623.90		75 623.90
Výnosy za vybrané:			75 371.00	75 371.00
Hospodářský výsledek za vybrané k 2018 / 12:				-252.90
Výběrová kritéria (omezení sestavy se řídí právy uživatele pracnar (uvedena v závorce))				
Pracoviště:	( 04[42 43]* 0490* )			
Činnost:	( *** *** )			
Fullcost:				
Zakázka:	2104 ( * * )			
Podzakázka:				