

Závěrečná zpráva projektu specifického výzkumu v roce 2017, zakázka č. 2104

Název projektu: Projekt specifického výzkumu Katedry fyziky

Specifikace řešitelského týmu

Odpovědný řešitel: Ing. Karol Radocha, Ph.D.

Studenti doktorského studia na UHK: viz přílohy a, b, c.

Studenti magisterského studia na PřF UHK: viz přílohy a, b, c.

Další výzkumní pracovníci: viz přílohy a, b, c.

Celková částka přidělené dotace: 350 000,- Kč

Datum zahájení řešení projektu: 27. 3. 2017

Předpokládané datum ukončení řešení projektu: 30. 11. 2018

Stručný popis postupu při řešení projektu (max. 2 strany). Viz přílohy a, b, c.

Splnění cílů řešení a přínos projektu. Cíle projektu zatím nejsou úplně splněny viz tabulka 1. Předpokládáme splnění všech výstupů do konce listopadu 2018.

Splnění kontrolovatelných výsledků řešení.

Uveďte jen výstupy, které vznikly na základě řešení tohoto projektu. Dále uveďte, zda byly publikace skutečně zadány do OBD s vazbou na RIV. Uveďte, které další výstupy plánujete do konce řešení projektu.

Tab. 1 Sumář výstupů řešení projektu

Typ výstupu	Plán v žádosti o projekt	Splněno	Plán do konce projektu	Poznámka (např. vyšlo, přijato, v redakčním řízení apod.)
Počet Jimp	3	3		v recenzním řízení 1x
Počet Jsc	4	2		2x vyšlo, 1x zasláno
Počet B				
Počet obhájených diplomových prací	2	2		
Počet D	3	3		2 články místo ve sbornících byly příspěvky publikovány v časopisech (viz Jsc a následující řádek)
Jrec – výstup v recenzovaném časopisu	0	1		
článek v odb. časopise (zatím není v databázi Scopus ani WOS)	0	1		
Počet výsledků celkem	12	10		

Podrobné zdůvodnění výdajů a doložení dodatečných žádostí o změnu rozpočtu:

Výsledek čerpání finančních prostředků uveďte v jednotné přehledné tabulce 2.

Tab. 2 Čerpání finančních prostředků v Kč

	Položka	Plán	Žádost o změnu rozpočtu	Skutečnost
	Počet členů řešitelského týmu čerpajících mzdové prostředky	11	10	10
	Počet studentů čerpajících mzdové prostředky	6	6	6
a	Stipendia	44 000,- Kč	26 000,- Kč	26 000,- Kč
b	Cestovní stipendium	55 000,- Kč	45 000,- Kč	42 370,- Kč
c	Odměny, DPP, DPC – zaměstnanci vč. zákonného zdr. a soc. pojištění	12 000,- Kč	17 097,- Kč	17 097,77,- Kč
d	Cestovné zaměstnanců	72 000,- Kč	68 903,- Kč	68 710,- Kč
e	Materiál (drobný dlouhodobý hmotný majetek)	98 000,- Kč	13 000,- Kč	11 098,- Kč
f	Další provozní náklady a výdaje (spotřební materiál)	18 000,- Kč	50 000,- Kč	54 269,- Kč
g	Služby	51 000,- Kč	130 000,- Kč	132 075,18,- Kč
	Celkové náklady	350 000,- Kč	350 000,- Kč	351 619,95,- Kč

- a) Stipendia a jejich stručné zdůvodnění: Ve stipendiích bylo vyplaceno méně z důvodu studentky, která odešla na rizikové těhotenství a nečerpala stipendium.
- b) Cestovní stipendia a jeho stručné zdůvodnění:
- c) Osobní náklady zaměstnanců a jejich stručné zdůvodnění:
- d) Cestovné zaměstnanců a jeho stručné zdůvodnění:
- e) Materiálové náklady a jejich stručné zdůvodnění:
- f) Další provozní náklady nebo výdaje (např. spotřební materiál) a jejich stručné zdůvodnění:
- g) Náklady a výdaje na služby a jejich stručné zdůvodnění:

Ke zprávě přiložte:

- a) kopie publikačních výstupů,
- b) výpis z OBD – výstupy podpořené tímto projektem,
- c) výsledovku z ekonomického informačního systému Magion – vyúčtování dotace.

Datum: 26. 11. 2018

Podpis odpovědného řešitele



Příloha a, Závěrečná zpráva projektu specifického výzkumu v roce 2017, (zakázka č. 2104)

Název projektu: Modelování emisních a absorpčních spekter prstencových molekulárních systémů

Specifikace řešitelského týmu:

Odpovědný řešitel: **Mgr. Jan Loskot**

Studenti doktorského studia na UHK: **Mgr. Jan Loskot** (ID: S16FY001DP, zahájení studia: 2016)

Mgr. Pavel Kabrhel (ID: S1319, zahájení studia: 2013)

Studenti magisterského studia na PřF UHK: **Bc. Andrea Hladíková** (ID: S16FY018NP)

Další výzkumní pracovníci: **Doc. RNDr. Pavel Heřman, Dr.,**

Cíle projektu, jejich splnění a přínos.

Co jsme slíbili:

Projekt navazuje na projekty specifického výzkumu z r. 2007 – 2016 a bude pokračovat ve směrech naznačených předchozími projekty.

1. Budeme se zabývat modelováním optických spekter prstencových molekulárních systémů - světlosběrných systémů purpurových bakterií (absorpce, fluorescence) a statistickými vlastnostmi hamiltoniánů pro tyto systémy.
2. Rozšíříme naše modelování na prstence s různým počtem molekul a různou orientací dipólových momentů.
3. Pokusíme se prsteneček LH4 modelovat se zahrnutím modelů statického nepořádku, které nebyly pro tento prsteneček použity v předchozích simulacích, a to jak s použitím aproximace nejbližších sousedů, tak v rámci modelu plného hamiltoniánu.
4. Zároveň bude do simulací zahrnut vliv dynamického nepořádku – fononové lázně. Použijeme některý z modelů spektrální hustoty fononů dostupných z literatury [5-8].

Jako výstupy byly plánovány **příspěvky na dvou mezinárodních konferencích, články ve sbornících z těchto konferencí a dva články v časopisech zařazených v databázi Scopus - Jsc** (popř. jeden článek Jsc a jeden článek v impaktovaném časopise - Jimp).

Co bylo uděláno:

Naším systémem byl molekulární komplex, který je modelem pro světlosběrný komplex LH2 z purpurových bakterií. Zkoumali jsme statistické vlastnosti hamiltoniánů (distribucí transferintegrálů) pro různé typy statického nepořádku spojeného s fluktuacemi geometrie komplexu. Nejdříve jsme se zabývali pouze jedním prstencem (prsteneček B850) z tohoto komplexu při zahrnutí fluktuací orientací dipólových momentů jednotlivých bakteriochlorofylů, následně pak celým komplexem (prsteneček B850 + prsteneček B800) při zahrnutí jiného typu statického nepořádku, a to fluktuací radiálních pozic bakteriochlorofylů.

Výstupy - skutečnost:

Organizátoři uvedených konferencí nesestavovali sborníky, ale příspěvky byly publikovány v časopisech:

- [1] Heřman, P.; Zapletal, D.; Loskot, J.; Hladíková, A.: Fluctuations of Pigment's Dipole Moment Orientations in B850 Ring from Photosynthetic Complex LH2. *WSEAS Transactions on Applied and Theoretical Mechanics* 12 (2017) 105-112. (článek Jsc - nachází se v databázi Scopus)
- [2] Heřman, P.; Zapletal, D.; Loskot, J.; Hladíková, A.: Fluctuations of Radial Positions of Bacteriochlorophylls in Whole Photosynthetic Complex LH2. *International Journal of Applied Physics* 2 (2017) 51-59. (článek v časopise, který zatím není zařazen ani do databáze Scopus, ani WoS)

Byly publikovány další články:

- [3] Heřman, P.; Zapletal, D.: B850 Ring from Light-Harvesting Complex LH2 - Fluctuations in Dipole Moment Orientations of Bacteriochlorophyll Molecules. *International Journal of Biology and Biomedical Engineering* 11 (2017) 39-47. (článek Jsc - nachází se v databázi Scopus)
- [4] Heřman, P.; Zapletal, D.: Photosynthetic Complex LH2 (B850 and B800 Ring) - Static Disorder in Radial Positions of Molecules. *International Journal of Biology and Biomedical Engineering* – zasláno.

Tab. 1 Sumář výstupů řešení projektu¹

Typ výstupu	Plán v žádosti o projekt	Splněno	Plán do konce projektu	Poznámka (např. vyšlo, přijato, v redakčním řízení apod.)
Počet obhájených dizertačních prací	0	0		
Počet obhájených diplomových prací	0	0		
Jimp - výstup v impaktovaném časopisu	1	0		
Jsc – výstup v databázi Scopus	2	3		
Jneimp – výstup v databázi ERIH				
Jrec – výstup v recenzovaném časopisu				
B – odborná kniha				
C – kapitola v odborné knize				
D – článek ve sborníku	2	0		místo ve sbornících byly příspěvky publikovány v časopisech (viz

¹ V případě, že vznikly typy výsledků neuvedené v tabulce, přidejte si do ní řádky.

				Jsc a následující řádek)
článek v odb. časopise (zatím není v databázi Scopus ani WOS)	0	1		
Počet výsledků celkem	5	4		

Všichni studenti se podíleli na uvedených výsledcích. J. Loskot a A. Hladíková jsou spoluautory dvou článků, P. Kabrhel pomáhal se zpracováním výsledků.



Datum: 26. 11. 2018

Seznam literatury podle šablony ID záznamu

[1]Heřman, P., Zapletal, D., Loskot, J., Hladíková, A. Fluctuations of Pigment's Dipole Moment Orientations in B850 Ring from Photosynthetic Complex LH2. *WSEAS transactions on applied and theoretical mechanics*. World scientific and engineering academy and society, 2017. 8s. ISSN: 1991-8747. Kód RIV: BB - Aplikovaná statistika, operační výzkum.

granty: 0

Spec. výzkum: S.

Forma: J_ČLÁNEK V ODBORNÉM PERIODIKU

(ID: 43873011) (RIV ID: 50013402)

[2]Heřman, P., Zapletal, D. B850 Ring from Light-Harvesting Complex LH2 - Fluctuations in Dipole Moment Orientations of Bacteriochlorophyll Molecules. *International journal of biology and biomedical engineering*. North atlantic university union, 2017. 9s. ISSN: 1998-4510. Kód RIV: BB - Aplikovaná statistika, operační výzkum.

granty: 0

Spec. výzkum: S.

Forma: J_ČLÁNEK V ODBORNÉM PERIODIKU

(ID: 43873013) (RIV ID: 50013404)

[3]Heřman, P., Zapletal, D. Photosynthetic Complex LH2 (B850 and B800 Ring) - Static Disorder in Radial Positions of Molecules. *WSEAS Transactions on Environment and Development*. World scientific and engineering academy and society, 2017. 11s. ISSN: 1790-5079. Kód RIV: BB - Aplikovaná statistika, operační výzkum.

granty: 0

Spec. výzkum: S.

Forma: J_ČLÁNEK V ODBORNÉM PERIODIKU

(ID: 43873403) (RIV ID: 50013794)

[4]Heřman, P., Zapletal, D., Loskot, J., Hladíková, A. Fluctuations of Radial Positions of Bacteriochlorophylls in Whole Photosynthetic Complex LH2. *International journal of applied physics*. IARAS, 2017. 9s. ISSN: 2367-9034. Kód RIV: BB - Aplikovaná statistika, operační výzkum.

granty: 0

Spec. výzkum: S.

Forma: J_ČLÁNEK V ODBORNÉM PERIODIKU

(ID: 43873411) (RIV ID: 50013802)

Příloha b, Závěrečná zpráva projektu specifického výzkumu v roce 2017 (zakázka č. 2104)

Název projektu: Rozptylové modely emisí na mapových podkladech, využití programů SYMOS a ArcGIS

Specifikace řešitelského týmu:

Odpovědný řešitel: **Mgr. Jan Loskot**

Studenti doktorského studia na UHK: **Mgr. Jan Loskot** (ID: S16FY001DP, zahájení studia: 2016)

Studenti magisterského studia na PřF UHK: **Bc. Vladimír Štěpánek** (ID: S14FY006NP)

Bc. Marek Smolík (ID: S14FY011NP)

Další výzkumní pracovníci:

doc. RNDr. Jan Kříž, Ph.D.

Ing. Lidmila Hyšplerová, CSc.

Cíle projektu, jejich splnění a přínos

Co jsme slíbili:

Projekt navazuje projekt specifického výzkumu z r. 2016 - 2017, který byl zaměřen na měření a matematické modelování rozptylu emisí těžkých kovů a modelování šíření zápachu z velkých zemědělských bioplynových stanic.

1. Měření a vyhodnocování rozptylu emisí těžkých kovů (olovo, arsen, kadmium, rtuť) z velkých zdrojů pomocí biomonitoringu, porovnání těchto experimentálních výsledků s výstupy modelování rozptylu emisí pomocí softwaru SYMOS. Přehledné zobrazení výsledků na mapových podkladech.
2. Provedení výpočtů šíření pachových látek (podle metodiky SYMOS'97 modifikované pro modelování rozptylu pachových látek) pro jeden z velkých zemědělských zdrojů emisí ve sledovaném regionu a porovnání výsledků tohoto modelu šíření zápachu se zkušenostmi obyvatel sousedících obcí.
3. Začlenění problematiky modelování emisí do vysokoškolské výuky; vytvoření fyzikálních úloh s environmentální tematikou na základě naměřených dat a výsledků modelování rozptylu znečišťujících/pachových látek z velkých průmyslových a zemědělských zdrojů emisí.

Plánované výstupy: prezentovat dosažené výsledky na mezinárodních vědeckých konferencích MED'17 v ČR a ECOpole'17 v PL a publikovat v je článkách v odborných časopisech (viz Tab. 1). Na projekt bude přímo navázáno dokončení časově velmi náročných diplomových prací studentů Bc. Vladimíra Štěpánka a Bc. Marka Smolíka.

Co bylo uděláno:

Užitím nástroje SYMOS jsme vytvořili matematický model rozptylu pachových látek z bioplynové stanice ve Lhotě pod Libčany. Vyhodnocením výsledků získaných užitím tohoto modelu jsme došli k závěru, že tato bioplynová stanice nezatěžuje zápachem přilehlé oblasti s obytnou zástavbou. Bioplynová stanice je tedy vhodně umístěna a správným způsobem provozována. Na základě výsledků tohoto výzkumu byla připravena výuková úloha zaměřená na matematické modelování rozptylu pachových látek vypouštěných z typického zdroje.

Výuková úloha je doplněna studijním textem na téma měření a modelování rozptylu pachových látek. Výsledky této části SV byly odeslány k publikování v odborném časopise CDEM indexovaném mj. v databázi ERIH Plus, příspěvek byl již akceptován.

Při návštěvě technologického parku Hitachi v Krefeldu jsme v rámci prohlídky elektronového mikroskopu provedli orientační strukturní a prvkovou analýzu vzorků popílku z uhelné elektrárny Chvaletice. Výsledky naznačují, že popílek obsahuje některé těžké kovy (např. arsen), avšak v současné době nelze činit závěry, protože UHK ještě není vybavena přístrojovou technikou nezbytnou pro provádění dalších potřebných analýz. Z tohoto důvodu jsme tento výzkum zatím nemohli publikovat.

Protože nemáme k dispozici laboratorní přístroje pro provádění analýz vzorků, věnovali jsme se místo toho matematickému modelování výtěžku bioplynu při procesu anaerobní fermentace v bioplynových stanicích. Navrhli jsme matematický postup, kterým lze zkrátit dobu dávkových („batch“) experimentů pro měření výtěžku bioplynu z agrikulturních substrátů. Tento postup, spolu s dalšími poznatky, se chystáme publikovat v impaktovaném časopise.

Je rozpracován příspěvek do sborníku Proceedings of ECOpole: Loskot, J., Štěpánek V., Hyšplerová, L., Kříž, J. Technology of PM and Mercury Emissions Reduction in Coal Power Plants, Modelling and Biomonitoring in Reference Points in CZ-PL Border Region.

Výstupy - skutečnost:

Prezentování výsledků na mezinárodních konferencích BioPhys Spring, MED'17, ECOpole'17 a RES – Theory and Practice.


Příspěvek do časopisu CDEM:

Loskot, J. Innovative Educational Course II: Modelling of Odour Dispersion from Agricultural Biogas Plants. CHEM DIDACT ECOL METROL. 2017;22(1-2)

Tab. 1 Sumář výstupů řešení projektu

Typ výstupu	Plán	Skutečnost	Poznámka (např. vyšlo, přijato, v redakčním řízení apod.)
Počet Jimp	2	1	
Počet Jsc			
Počet B			
Počet obhájených dizertačních prací			
Počet obhájených diplomových prací	2	2	nebude uznáno do vyhodnocení SV
Počet D	1	0	nebude uznáno do vyhodnocení SV
Počet výsledků celkem	5	3	

Část cílů projektu byla splněna, jeden bude nesplněný.


Datum: 26. 11. 2018

Seznam literatury podle šablony ID záznamu

[1] **Loskot, J.** INNOVATIVE EDUCATIONAL COURSE II: MODELLING OF ODOUR DISPERSION FROM AGRICULTURAL BIOGAS PLANTS. *Chemistry-didactics-ecology-metrology*. De Gruyter, 2017. 16s. ISSN: 1640-9019. Kód UT ISI: 000427583100008. Kód RIV: AM - Pedagogika a školství.

granty: 0

Spec. výzkum: S.

Forma: J_ČLÁNEK V ODBORNÉM PERIODIKU

(ID: 43873714) (RIV ID: 50014105)

Příloha c, Závěrečná zpráva projektu specifického výzkumu v roce 2017, (zakázka č. 2104)

Název projektu: Studium elektromagnetických prekurzorů zemětřesení

Specifikace řešitelského týmu:

Odpovědný řešitel: Mgr. Daniela Koudelková (1. ročník doktorského studia oboru Didaktika fyziky, studium zahájeno v září 2016, ID: S16FY002DK)

Studenti doktorského studia na PřF UHK (rok zahájení a plán. ukončení):

Studenti magisterského studia na PřF UHK (ročník Mgr. studia): Bc. Leontýna Břízová (2. ročník Mgr. studia N1701/NFYSSK-NMATSSK, ID: S15FY018NP)

Další výzkumní pracovníci: RNDr. Jan Šlégr, Ph.D. (školitel doktorandky)
RNDr. Michaela Křížová Ph.D.

Cíle projektu, jejich splnění a přínos.

Co jsme slíbili:

Předkládaný návrh navazuje na předchozí projekt specifického výzkumu *Studium ionosférických prekurzorů zemětřesení*. V rámci tohoto projektu byla zkoumána spojitost mezi změnami v ionosféře Země a vznikem zemětřesení. Změny ionosféry jsou pouze jedním z mnoha slibných prekurzorů zemětřesení. Dalším takovým je emise elektromagnetických vln z širšího okolí epicentra.

Výstupem projektu měl být jeden článek v časopise zařazeném do databáze Scopus – Jsc a jeden článek v impaktovaném časopise Jimp.

Co bylo uděláno:

Vzhledem k rizikovému těhotenství odpovědné řešitelky bylo zapotřebí cíle projektu poněkud přeformulovat, byla významně rozšířena didaktická stránka, kterou se zabývala Mgr. Břízová, která se mezitím stala studentkou doktorského studia. Jedna z didaktických aplikací byla popsána v českém článku [i], který je přijat k publikaci v časopise MFI, zařazeném na seznam recenzovaných neimpaktovaných periodik vydávaných v ČR, a v článku [ii], který je v recenzním řízení časopisu *European Journal of Physics* (IF = 0.629). Během práce na tomto článku byly objeveny zajímavé matematické postupy, které byly publikovány v časopise *Pokroky matematiky, fyzika a astronomie* [iii], zařazeném na seznam recenzovaných neimpaktovaných periodik vydávaných v ČR (vyšlo v čísle 4/2017). Další didaktické aplikace byly popsány v článku [iv], který je v recenzním řízení časopisu *American Journal of Physics* (IF 0.956). Kdyby některý z výstupů nebyl otištěn v impaktovaném časopise, byl by následně zaslán do časopisu *Physics Education* (Jsc).

Výstupy – skutečnost:

Vyšlo:

[i] Břízová, L.; Křížová, M.; Šlégr, J.: Demonstrační mikrovlnný radiometr pro školní použití. *Matematika-Fyzika-Informatika* (2018)

[ii] Břízová, L.; Šlégr, J.: Simple microwave radiometer for laboratory exercises and lecture demonstrations. *European Journal of Physics*.

[iii] Studnička, F.; Šlégr, J.: Problém ohnuté kolejnice a kouzlo numerické matematiky. *Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*. 4/2017

(tyto publikační výstupy jsou zadány do OBD, ale jen některé z nich jsou označeny jako přijaté)

Stále v recenzním řízení:

[iv] Břízová, L.; Šlégr, J.: SDR-based hydrogen line radio telescope for undergraduate laboratory. *American Journal of Physics*.

Tab. 1 Sumář výstupů řešení projektu²

Typ výstupu	Plán v žádosti o projekt	Splněno	Plán do konce projektu	Poznámka (např. vyšlo, přijato, v redakčním řízení apod.)
Počet obhájených dizertačních prací	0	0		
Počet obhájených diplomových prací	0	0		
Jimp - výstup v impaktovaném časopisu	1	2		1x vyšlo, 1x v recenzním řízení
Jsc – výstup v databázi Scopus	1	0		
Jneimp – výstup v databázi ERIH				
Jrec – výstup v recenzovaném časopisu	0	1		vyšlo
B – odborná kniha				
C – kapitola v odborné knize				
D – článek ve sborníku				
článek v odb. časopise (zatím není v databázi Scopus ani WOS)				
Počet výsledků celkem	2	3		

Datum: 26. 11. 2018



² V případě, že vznikly typy výsledků neuvedené v tabulce, přidejte si do ní řádky.

Seznam literatury

Seznam literatury podle šablony ID záznamu

[1] Studnička, F., Šlégr, J. Problém ohnuté kolejničky a kouzlo numerické matematiky. *Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*. Jednota českých matematiků a fyziků, 2018. 8s. ISSN: 0032-2423. Kód RIV: BA - Obecná matematika.

granty: 0

Spec. výzkum: S.

Forma: J_ČLÁNEK V ODBORNÉM PERIODIKU

(ID: 43873635) (RIV ID: 50014026)

[2] Šlégr, J., Břízová, L. Simple microwave radiometer for laboratory exercises and demonstration experiments. *European journal of physics*. IOP publishing, 2018. 9s. ISSN: 0143-0807. Kód UT ISI: 000437729400002.

granty: 0

Spec. výzkum: S.

Forma: J_ČLÁNEK V ODBORNÉM PERIODIKU

(ID: 43874414) (RIV ID: 50014804)

[3] Břízová, L., Křížová, M., Šlégr, J. Demonstrační mikrovlnný radiometr pro školní použití. 2018.

granty: 0

Spec. výzkum: S.

Forma: J_ČLÁNEK V ODBORNÉM PERIODIKU

(ID: 43874415) (RIV ID: 50014805)
