

Průběžná výroční zpráva projektu specifického výzkumu zakázka č. 2104/ 2019

Název projektu: Modelování optických vlastností molekulárních systémů

Specifikace řešitelského týmu

Odpovědný řešitel: doc. RNDR. Pavel Heřman, Dr.

Studenti doktorského studia na UHK: Mgr. Dominik Miškář

Studenti magisterského studia na PŘF UHK: Andrea Svitáková (Hladíková)

Další výzkumní pracovníci: doc. RNDr. Jan Kříž, Ph.D., školitel doktoranda

Celková částka přidělené dotace: 35010 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, projekt je pokračováním projektů z let 2007–2018. 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 světlosběrné komplexy LH2 z anténního systému purpurové bakterie *Rhodospirillum rubrum* (Rbl.) *acidophilus* (původní označení *Rhodospirillum rubrum* (Rps.) *acidophila*) a komplex LH4 z bakterie *Rhodospirillum rubrum* (Rbc.) *sphaeroides*. 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.

V posledních letech byly řešeny tyto důležité problémy:

a) vliv dynamického nepořádku – koherentní a nekoherentní režim přenosu excitonu

K popisu vlivu interakce excitonu s fononovou lázní (dynamický nepořádek) na fyzikální vlastnosti je nutno celý systém rozdělit na dvě části – relevantní subsystém a zbytek (lázeň). Síla interakce mezi excitonem a fonony rozhoduje o tom, která část celého systému tvoří relevantní subsystém. Mimo případu čistě nekoherentního přenosu, ve kterém se pro popis časového vývoje pravděpodobnosti obsazení jednotlivých míst používají Pauliho řídicí rovnice (PME), je nutno používat velmi komplikované rovnice pro excitonovou matici hustoty (popř. jiné ekvivalentní metody), neboť na časový vývoj systému mají vliv nejen pravděpodobnosti obsazení (diagonální maticové elementy matice hustoty), ale i fázové vztahy dané nediagonálními maticovými elementy. Dosavadní publikované výsledky zahrnují diagonální exciton-fononovou vazbu.

[1] Heřman, P.; Zapletal, D: Modelling of Spectral Profiles of Molecular Systems - Light Harvesting Complex LH4. International Journal of Modern Physics B.

Článek je zatím v recenzním řízení a předpokládáme, že bude publikován v roce 2020.

2. Byla naplánována 1 obhájená diplomová práce. Diplomantka Andrea Svitáková obhájila v rámci projektu diplomovou práci:

[2] Svitáková, A.: Modelování optických vlastností jednoduchých molekulárních systémů.

Po publikování článku [1] bude skutečnost souhlasit s plánem.

Tab. 1 Sumář výstupů řešení projektu

Typ výstupu	1. rok	2. rok	3. rok	Poznámka
Hodnocené výstupy projektu				
Jimp (databáze WoS)	1			článek je v recenzním řízení
Jsc (databáze Scopus)				
B (recenzovaná odborná kniha) ^{1*}				
C (kapitola v recenzované odborné knize)*				
D (článek ve sborníku ve WoS, Scopus)				
P (patent)				
Počet výsledků	1			
Nehodnocené výstupy projektu				
Počet obhájených dizertačních prací				
Počet obhájených diplomových prací	1			
Počet výsledků	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)
Skříň na chemikálie		8 422,00

Spotřební náklady (spotřební a kancelářské potřeby)	Stručné zdůvodnění nákupu	Cena včetně DPH (Kč)
Tonery do barevné a černobílé tiskárny + kancelářské potřeby		16 685,22

V projektu byla původně na spotřebu materiálu plánována částka 3 010 Kč. Protože však částka plánovaná na služby (publikační poplatky) nebyla vyčerpána k uvedenému účelu, bylo požádáno (31.10.2019) o zvýšení položky na 25 100 Kč. Tato částka byla použita na nákup tonerů do barevné a černobílé tiskárny, na papíry do tiskárny a další kancelářské potřeby. Byla též zakoupena skříň na chemikálie, kterou hodláme použít na ukládání vzorků pro měření.

* Pouze renomovaná nakladatelství Elsevier, Springer, Bentham apod.

Cestovní stipendia studentů

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

Cestovní stipendia nebyla plánována ani čerpána.

g) Další položky (uvedte čísla dle IS Magion):
další položky a jejich stručné zdůvodnění

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
	Počet členů řešitelského týmu čerpajících mzdové prostředky	0		0	
	Počet studentů čerpajících mzdové prostředky	2		2	
501	Spotřeba materiálu DHIM	3 010,00		25 107,22	
512	Cestovné	0,00	31.10.2019	1 924,00	
518	Ostatní služby	26 000,00	31.10.2019	0,00	
521	Mzdové náklady	0,00		0,00	
524	Zákonné pojištění	0,00		0,00	
549	Jiné ostatní náklady (stipendia)	6 000,00	31.10.2019	8 000,00	
	Celkové náklady	35 010,00		35 031,22	

Přílohy:

- kopie publikačních výstupů,
- výsledovka z ekonomického informačního systému Magion – vyúčtování dotace,
- Žádost o povolení změn v rozpočtu.

Zpráva neobsahuje kopii záznamu z OBD, neboť článek zatím nemohl být do OBD zadán.

Datum: 9. 1. 2020

Podpis odpovědného řešitele:

Výsledovka s očekávanými náklady
Pohyby za období 01 - 12 / 2019

Účet	Název účtu	Má dáti	Dal	Zůstatek
Pracoviště:	*****	Všechny vybrané analytiky		
Činnost:	****	Všechny vybrané analytiky		
Fullcost:	*****	Všechny vybrané analytiky		
Zakázka:	2104	SV Molekulární systémy - modelování		
Podzakázka:	***	Všechny podzakázky		
501 003	Spotřeba materiálu kancelářské DU			
	Počáteční stav	0,00		
	ZAV/0411/00766/19 31.10.2019	345		0 kancelářské potřeby,
	ZAV/0411/00929/19 25.11.2019	2424		0 kancelářské potřeby
	ZAV/0411/01040/19 12.12.2019	1989.24		0 tonery
	ZAV/0411/01041/19 12.12.2019	7305.98		0 tonery
501 003	Spotřeba materiálu kancelářské DU	12 064,22	0,00	12 064,22
501 008	Spotřeba materiálu DHIM DU			
	Počáteční stav	0,00		
	MAJ/0407/00039/19 05.12.2019	1972		0 000019551 ŘEZAČKA KOTOUČOVÁ KW TRIO 3919
	MAJ/0407/00039/19 05.12.2019	8422		0 000020953 SKŘÍŇ NA CHEMIKÁLIE 1950x490x400
	MAJ/0407/00039/19 05.12.2019	2649		0 000019552 VAZAČ COMB S-60
501 008	Spotřeba materiálu DHIM DU	13 043,00	0,00	13 043,00
501	Spotřeba materiálu	25 107.22	0.00	25 107.22
512 002	Cestovné tuzemské zaměst DU			
	Počáteční stav	0,00		
	CES/0401/00354/19 22.11.2019	481		0 Heřman,CZ,,11.11.19-11.11.19
	CES/0401/00355/19 22.11.2019	481		0 Heřman,CZ,,18.11.19-18.11.19
	CES/0401/00360/19 25.11.2019	481		0 Heřman,CZ,,22.11.19-22.11.19
	CES/0401/00367/19 27.11.2019	481		0 Heřman,CZ,,25.11.19-25.11.19
512 002	Cestovné tuzemské zaměst DU	1 924,00	0,00	1 924,00
512	Cestovné	1 924.00	0.00	1 924.00
549 006	Jiné ostatní náklady mimoř.stip. DU			
	Počáteční stav	0,00		
	BAN/0802/13795/19 27.05.2019	2000		0 1 Svitáková Andrea
	BAN/0802/25606/19 03.10.2019	4000		0 1 Myškář Dominik
	BAN/0802/28271/19 06.11.2019	2000		0 1 Dominik Myškář
549 006	Jiné ostatní náklady mimoř.stip. DU	8 000,00	0,00	8 000,00
549	Jiné ostatní náklady	8 000.00	0.00	8 000.00
	Náklady celkem	35 031.22	0.00	35 031.22
691 006	Provoz.dotace věda MŠMTspecifický výzkum			
	Počáteční stav		0,00	
	MAN/0910/00008/19 01.02.2019	0		35010 Dotace Specifický výzkum
691 006	Provoz.dotace věda MŠMTspecifick	0,00	35 010,00	35 010,00
691	Přijaté přís. mezi zúčt.mezi org.slož.	0.00	35 010.00	35 010.00
	Výnosy celkem	0.00	35 010.00	35 010.00
	Účetní hospodářský výsledek:			-21.22
	Hospodářský výsledek včetně očekávaných nákladů:			-21.22
	Účetní hospodářský výsledek za vybrané:			-21.22
	Hospodářský výsledek včetně očekávaných nákladů za vybrané:			-21.22
	Výběrová kritéria (omezení sestavy se řídí právy uživatele pracnar (uvedena v závorce))			
	Pracoviště: (04[42 43]* 0490* 0448* 0144*)			
	Činnost: (*** *** *** ***)			
	Fullcost:			
	Zakázka: 2104 (* * 1000 *)			
	Podzakázka:			
	Zahrnutý všechny předpokládané náklady			

Žádost o povolení změny v rozdělení finančních prostředků zakázky č. 2104

Původní rozpočet

Celková částka	35010,- Kč
Mzdové prostředky	0,- Kč
Stipendia	6000,- Kč
Odměny a DPP, DPČ	0,- Kč
Zákonné zdravotní a sociální pojištění	0,- Kč
Materiál	3010,- Kč
Drobný hmotný a nehmotný majetek	0,- Kč
Služby	26000,- Kč
Cestovné celkem	0,- Kč
Cestovné zahraniční	0,-Kč
Cestovné domácí	0,-Kč
Investice	0,- Kč

Nový rozpočet

Celková částka	35010,- Kč
Mzdové prostředky	0,- Kč
Stipendia	8000,- Kč
Odměny a DPP, DPČ	0,- Kč
Zákonné zdravotní a sociální pojištění	0,- Kč
Materiál	10010,- Kč
Drobný hmotný a nehmotný majetek	15000,- Kč
Služby	0,- Kč
Cestovné celkem	2000,- Kč
Cestovné zahraniční	0,- Kč
Cestovné domácí	2000,- Kč
Investice	0,- Kč

Důvod pro změny je následující:

Původní částka v položce služby byla plánována na zaplacení publikačního poplatku. Vzhledem k tomu, že článek není zatím přijat (je již dlouhou dobu v recenzním řízení), žádám o možnost přerozdělení těchto prostředků takto (změněné položky jsou zvýrazněny):

- a) 2000 Kč použít na navýšení částky na stipendium pro studenta doktorského studia D. Miškáře za práci na projektu,
- b) 15000 Kč použít na zakoupení bezpečnostní skříně, ve které se budou skladovat vzorky pro měření tak, abychom mohli porovnat výsledky našich výpočtů a výsledky experimentů,