

AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY 2014–2015

Obsah:

Slovo předsedy AV ČR Jiřího Drahoše

Akademie věd ČR v roce 2014 ve faktech a číslech

- Poslání AV ČR
- Hospodaření AV ČR a jejích pracovišť, účast v projektech, zaměstnanci

Průřez výsledků výzkumů

I. Neživá příroda

- Matematika, fyzika a informatika
- Aplikovaná fyzika
- Vědy o Zemi

II: Živá příroda a chemické vědy

- Chemické vědy
- Biologické a lékařské vědy
- Biologicko-ekologické vědy

III. Humanitní a společenské vědy

- Sociálně-ekonomické vědy
- Historické vědy
- Humanitní a filologické vědy

Nová výzkumná centra a pracoviště AV ČR

Spojení vědy s praxí

Knižní publikace

Akademie jako partner

- Mezinárodní spolupráce
- Regionální spolupráce
- Spolupráce se školami

Ceny a medaile

Představujeme...

Podpora mladých vědců a rovných příležitostí

Věda a veřejnost

- Popularizace vědy
- Věda a umění

Akademie věd ČR v roce 2015

- Strategie AV21
- AV ČR 2015 – věda a výzkum
- AV ČR 2015 – aktuální dění

AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY

SLOVO PŘEDSEDY AV ČR

PROFESORA JIŘÍHO DRAHOŠE

I v roce 2014 pokračovaly v Akademii věd diskuse o organizaci výzkumu, o jejích dalších úkolech a příštím směřování. Aby se výrazněji profilovala jako instituce, jejímž posláním je špičkový výzkum ve veřejném zájmu, Akademie věd představila výzkumnou Strategii AV21.

V případě nové strategie jde spíše o vytvoření systémového rámce pro to, co už do značné míry existuje, tedy pro interdisciplinární výzkum, a nadto chceme podpořit meziinstitucionální synergie nejen uvnitř Akademie, ale i ve spolupráci s vysokými školami, podniky a státní správou. V této souvislosti bych rád zdůraznil, že systém Akademie věd a jejích pracovišť umožňuje koncepční a efektivní práci a je přitom dostatečně flexibilní k tomu, aby výzkumné týmy mohly reagovat jak na světový vývoj daného oboru, tak i na společenskou poptávku. Dokonce jsem přesvědčen, že právě tato flexibilita neuniverzitního výzkumu by měla do budoucna představovat jednu z důležitých konkurenčních výhod České republiky. Pracoviště Akademie věd, přestože jsou úzce propojena se vzdělávacím procesem, mají totiž ve srovnání s univerzitami nezbytné předpoklady a současně i povinnost orientovat se především na řešení vysoce specializovaných či rozsáhlých interdisciplinárních projektů, které vyžadují dlouhodobé soustředění kapacit a nákladnou infrastrukturu. Témata, jako například energetická budoucnost České republiky, zdraví občanů nebo kvalita veřejných politik, představují složité okruhy problémů, jejichž řešení si vyžaduje široce založený interdisciplinární výzkum, který bude rozvíjen v Akademii věd právě díky její nové strategii.

Co bylo impulzem pro přípravu Strategie AV21?

Přestože je Akademie věd institucí špičkového základního výzkumu, chceme se ještě více věnovat veřejnému zájmu, prospěchu společnosti, tj. reagovat na důležité výzvy naší doby a dokládat, že základní výzkum je zcela klíčový nejen pro rozšiřování znalostí, ale je rovněž hnacím motorem skutečných inovací v mnoha oblastech lidské činnosti. I v nové koncepci Akademie věd zůstává špičkový základní výzkum primární charakteristikou její činnosti, ovšem nově klademe důraz na strategickou orientaci výsledků do ekonomicky a společensky významných oblastí. To je smyslem Strategie AV21 a jejích interdisciplinárních výzkumných programů.

Zatím je zformulováno 14 výzkumných programů. Komu jsou otevřeny?

Programový rámec strategie byl dokončen koncem roku 2014 s tím, že i v budoucnu bude možné navrhovat další programy. Očekáváme, že plnění Strategie AV21 výrazně přispěje k efektivnějšímu přenosu výsledků výzkumu do vzdělávací a aplikační sféry včetně veřejné správy, a to v důsledku přímého zapojení našich partnerů z vysokých škol, z podniků a ze státní administrativy do tvorby a řešení výzkumných programů Akademie věd. Pevně věřím, že naše dosavadní spolupráce tak dostane nový impuls, který podpoří jak konkrétní projekty spolupráce mezi akademickou a podnikatelskou sférou, tak i vznik vědecky podložených podkladů pro politické rozhodování. Zdůrazňuji, že jsme připraveni k diskusi o nových možných formách spolupráce, které nám strategie nabízí.

Motto „Špičkový výzkum ve veřejném zájmu“ naznačuje směr k orientovanému výzkumu, který reaguje na aktuální potřeby společnosti. Jaké výstupy očekáváte a kdy předpokládáte první výsledky?

Typickými kategoriemi výstupů budou specializované publikace, studie, analýzy, expertní stanoviska a průmyslově aplikovatelné výstupy. Výzkumné programy přinesou rovněž další dílčí výsledky ve formě vědeckých jednání, odborných a populárních přednášek nebo účasti na veřejných diskusích. Výzkumné programy Akademie věd budou pravidelně prověřovány a následně i upravovány právě na základě dosahovaných výsledků, případně bude možné navrhnout programy nové v závislosti na aktuálním stavu poznání. Obecně lze říci, že koordinátoři všech 14 programů nedostali přesný časový plán, ale zhruba za rok se podíváme, jak program funguje a co má šanci v blízké budoucnosti přinést. Programy, které by nesměřovaly k dostatečně vědecky kvalitním a společensky relevantním výsledkům, budou po dohodě s jejich koordinátory přepracovány nebo ukončeny.

Prof. Ing. Jiří Drahoš, DrSc., dr. h. c.

AKADEMIE VĚD V ROCE 2014 VE FAKTECH A ČÍSLECH

Poslání AV ČR

Před činností Akademie věd ČR, která přinesla i v roce 2014 nové poznatky z oborů přírodních, technických, humanitních i sociálních, by se jistě v úctě sklonili i zakladatelé jejích dvou předchůdkyň: *Královské české společnosti nauk*, od jejíhož vzniku uplynulo loni 230 let, a *České akademie císaře Františka Josefa pro vědy, slovesnost a umění*, která vznikla v roce 1890, tedy právě před 125 lety.

Posláním Akademie věd ČR, jakožto přední české vědecké a kulturní instituce, je uskutečňovat vědecký výzkum v širokém spektru vědních oborů (od matematiky a informatiky přes vědy o neživé a živé přírodě, včetně technických, chemických a lékařských věd, až ke společenskovědním a humanitním disciplínám), přispívat ke zvýšení úrovně poznání a vzdělanosti, přispívat k využití výsledků vědeckého výzkumu, získávat, zpracovávat a rozšiřovat vědecké informace a poskytovat vědecké posudky, stanoviska a doporučení. Ve spolupráci s vysokými školami uskutečňovat doktorské studijní programy a vychovávat vědecké pracovníky, rozvíjet mezinárodní spolupráci v oblasti vědecké činnosti a vývoje technologií, realizovat své úkoly ve spolupráci s ostatními vědeckými a odbornými institucemi a zajišťovat infrastrukturu pro výzkum a vývoj.

Mezinárodní charakter bádání a snaha Akademie věd ČR provádět výzkum na úrovni srovnatelné se světem současně znamená, že výzkumná činnost a vědecké týmy jednotlivých ústavů pravidelně procházejí hodnocením, na němž se podílejí i zahraniční experti a používají se kritéria obvyklá ve světě.

Hospodaření AV ČR a jejích pracovišť, účast v projektech, zaměstnanci

Přímá institucionální podpora Akademie věd ČR ze státního rozpočtu (SR) v roce 2014 činila **4 453 mil. Kč**. Tyto prostředky byly vynaloženy na činnost 54 pracovišť AV ČR (celkem 4 385 mil. Kč) a na provoz Kanceláře AV ČR, která zajišťuje koordinaci, hodnocení a podporu činnosti ústavů AV ČR (68 mil. Kč).

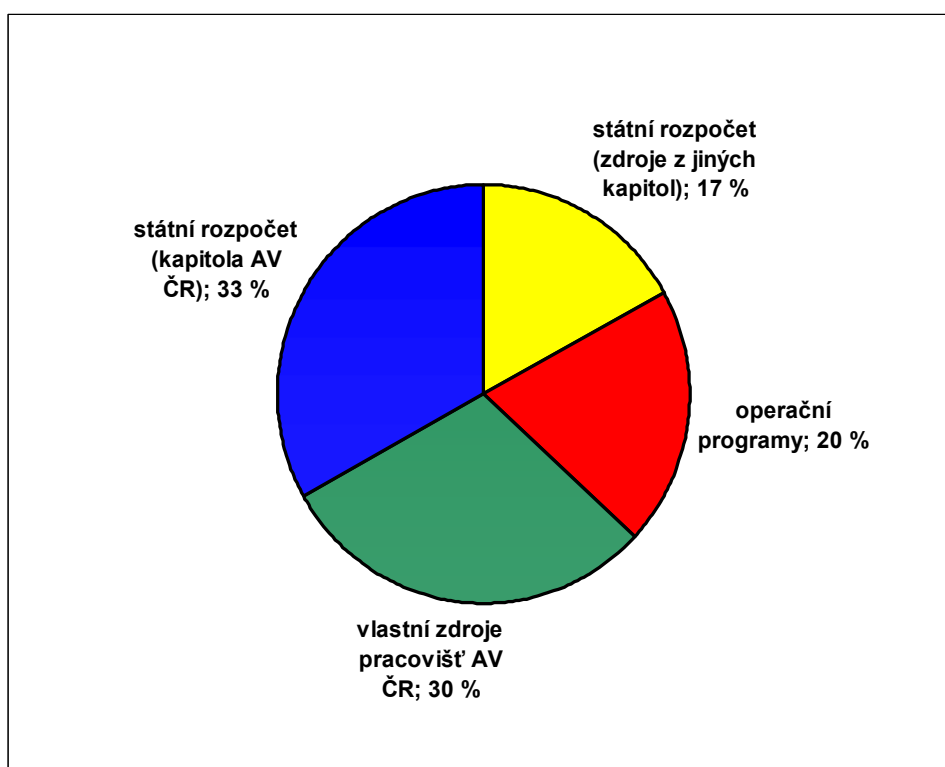
Pracoviště AV ČR navíc získala **ve veřejných soutěžích o projekty** Grantové agentury ČR, Technologické agentury ČR, Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy a dalších poskytovatelů **ze státního rozpočtu účelovou podporu** celkem **2 354 mil. Kč**. V roce 2014 tak pracoviště AV ČR řešila celkem **1 590 konkrétních výzkumných projektů** financovaných ze státního rozpočtu (z toho 1 221 jako příjemce a 369 jako další účastník projektu).

V rámci soutěží o projekty **z operačních programů podporovaných ze strukturálních fondů EU** pracoviště AV ČR nabylo v roce 2014 prostředky v úhrnné výši **2 689 mil. Kč**, určené převážně na vybudování nových výzkumných kapacit a modernizaci

infrastruktury. Pracoviště AV ČR byla v roce 2014 zapojena do řešení **126 těchto projektů**, přičemž v 64 z nich byla koordinátorem či příjemcem.

Ze své **vlastní ekonomické činnosti** (prodej licencí, zahraniční a mezinárodní projekty, prodej publikací a služeb atd.) získala pracoviště AV ČR další zdroje v celkové výši **3 964 mil. Kč**.

Finanční zdroje AV ČR v procentech:



Účast pracovišť AV ČR na projektech VaVaI (věda, výzkum a inovace) v roce 2014 podle Výroční zprávy AV ČR za rok 2014:

Poskytovatel	Pracoviště AV ČR příjemcem	Pracoviště AV ČR dalším účastníkem	Celkem
	počet projektů	počet projektů	počet projektů
Grantová agentura ČR	853	186	1 039
Ministerstvo kultury ČR	28	4	32
Ministerstvo průmyslu a obchodu ČR	3	27	30
Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy ČR	253	16	269
Ministerstvo vnitra ČR	8	2	10
Ministerstvo zdravotnictví ČR	13	32	45
Ministerstvo zemědělství ČR	14	1	15

Technologická agentura ČR	49	101	150
CELKEM	1 221	369	1 590

Účast pracovišť AV ČR na řešení projektů operačních programů v roce 2014

Operační program	projekty zahájené	projekty pokračující	projekty ukončené	CELKEM
OP Česká republika - Rakousko	0	0	1	1
OP Lidské zdroje a zaměstnanost	0	2	0	2
OP Nadnárodní spolupráce	0	0	1	1
OP Podnikání a inovace	0	2	1	3
OP Praha Adaptabilita	0	0	2	2
OP Praha Konkurenceschopnost	8	0	0	8
OP Výzkum a vývoj pro inovace	2	1	2	5
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost	3	22	15	40
OP Životní prostředí	2	0	0	2
CELKEM	15	27	22	64

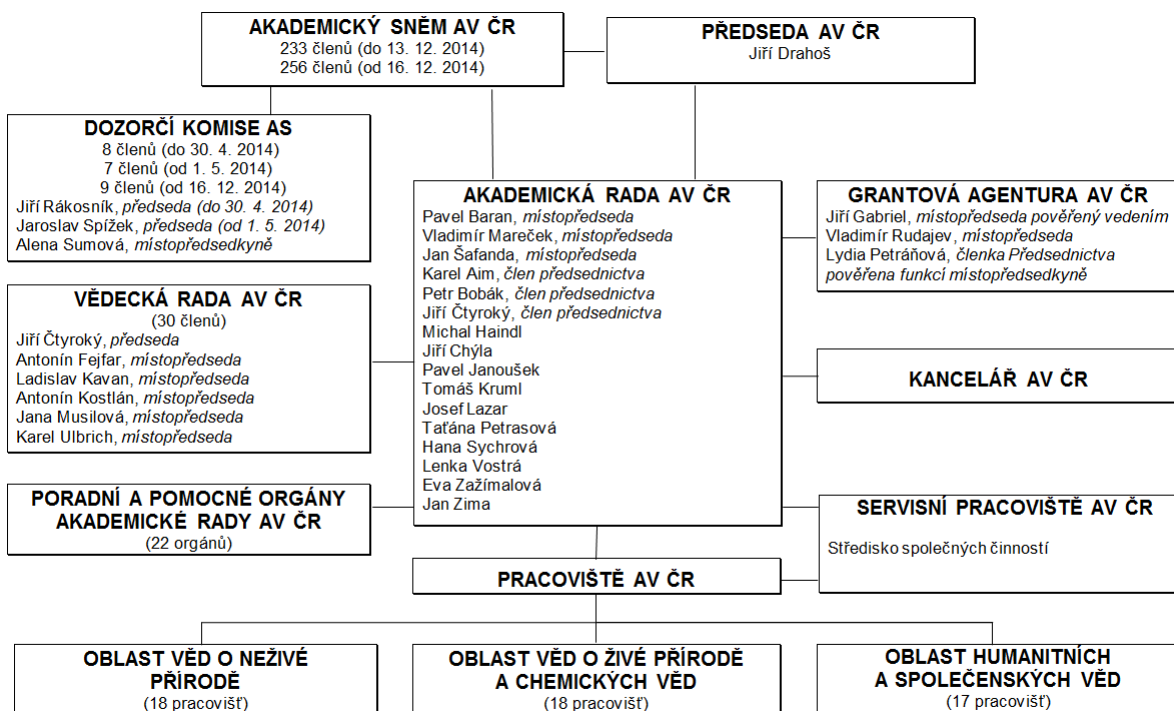
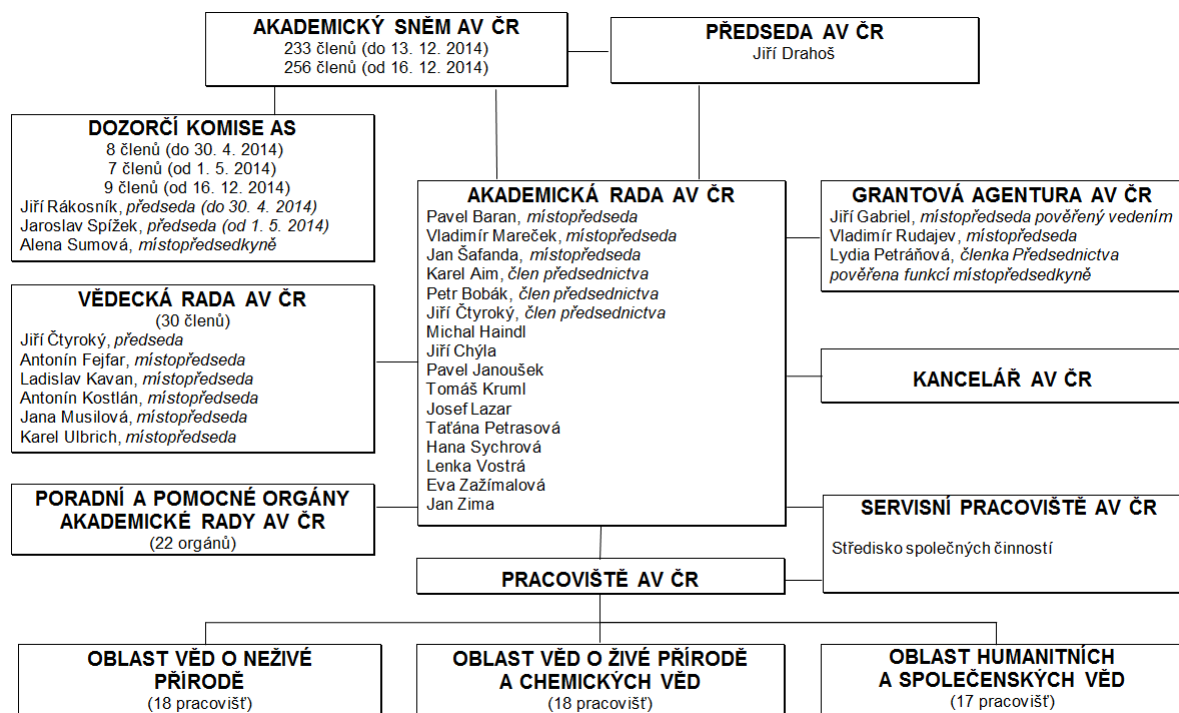
Všechny finanční zdroje AV ČR včetně jejích pracovišť dosáhly v roce 2014 v součtu 13 460 mil. Kč. Z těchto prostředků byly hlavními vynaloženými položkami 5 069 mil. Kč na osobní náklady, 2 458 mil. Kč na pořízení přístrojů a zařízení, 1 671 mil. Kč na financování staveb, 1 506 mil. Kč na nákup služeb, 900 mil. Kč na nákup materiálu, 261 mil. Kč na nákup vody, energie a paliv, 258 mil. Kč na cestovné a 229 mil. Kč na opravy a údržbu.

Zaměstnanost a mzdy

Přepočteno na plné úvazky pracovalo v roce 2014 v Akademii věd ČR 8 505 zaměstnanců, z toho 4 935 atestovaných vědeckých pracovníků.

Průměrný měsíční výdělek zaměstnanců AV ČR činil 36 155 Kč (tj. meziroční nárůst oproti roku 2013 o 2,3 %).

STRUKTURA AV ČR



PRŮŘEZ VÝSLEDKŮ VÝZKUMŮ

Akademii věd ČR tvoří 54 pracovišť – veřejných výzkumných institucí (v. v. i.), přičemž věda a výzkum jsou rozděleny do tří oblastí: první zahrnuje vědy o neživé přírodě, druhá vědy o živé přírodě a chemické vědy a třetí pak vědy humanitní a společenské. Z ohromné šíře jejich bádání i z dlouhé řady výsledků dosažených v roce 2014 je zde možné zachytit pouhý zlomek.

I. Neživá příroda:

Matematika, fyzika a informatika

Výzkumná činnost sahá od oborů čistě teoretických až po aplikované disciplíny, od mikrosvěta elementárních částic až po kosmické záření, od interakcí složitých pochodů v mozku či klimatických dějů až po umělou inteligenci.

- Astronomický ústav AV ČR <http://www.asu.cas.cz/>
- Fyzikální ústav AV ČR <http://fzu.cz/>
- Matematický ústav AV ČR <http://www.math.cas.cz/>
- Ústav informatiky AV ČR <http://www.ustavinformatiky.cz/>
- Ústav jaderné fyziky AV ČR <http://www.ujf.cas.cz/>
- Ústav teorie informace a automatizace AV ČR <http://www.utia.cas.cz/>

Matematické a inforatické metody, které se zde rozvíjejí, slouží nejen oborům z oblasti věd o neživé přírodě, ale i vědám biologickým či chemickým a často také společenskovedním a humanitním oborům. Zkoumají se vztahy a vzájemně ovlivňování mezi ději v nejrůznějších složitých systémech, klimatem či ekologií počínaje a lidským mozkem konče. Pracuje se na rozhodovacích systémech, které se dokážou adaptovat – mění své chování v reakci na chování okolního prostředí. Vědci se soustřeďují i na zpracování obrazové informace a rozpoznávání vzorů, na obnovu poškozených snímků, na forenzní analýzu obrazové informace. Vyvíjejí metody a aplikace určené kupříkladu pro biomedicínu, dálkový průzkum Země či astronomii, ale také pro restaurování uměleckých děl atp.

Fyzikové studují mikrosvět elementárních částic a podílejí se na vývoji detektorů pro jejich výzkum, zabývají se i kosmickým zářením extrémních energií. Intenzivně se věnují kondenzovaným látkám, mezi jiným nanočásticím, včetně např. magnetických vlastností (superpara)magnetických nanočástic pro biomedicínské aplikace, magnetických a transportních vlastností uhlíkových nanomateriálů, zkoumají materiály v extrémních podmínkách vysokých tlaků, ultranízkých teplot či silných magnetických polí. V oblasti pevných látek vyvíjejí nové typy polovodičů, rozvíjejí nové obory spintroniky a nanoelektroniky, zabývají se optickými a biofyzikálními systémy, ale i přípravou tenkých vrstev plazmo-chemickými metodami či radiační a chemickou fyzikou, včetně vývoje a využití laserů. Jaderní fyzikové experimentálně studují jaderné reakce významné pro astrofyziku nebo jadernou energetiku, jejich metody slouží odborníkům v chemii, ekologii, lékařství či dokonce v archeologii, pracují na výzkumu a vývoji radiofarmak k diagnostickým nebo léčebným účelům, kupříkladu pro emisní pozitronovou tomografii nebo k cílené léčbě nádorů.

Další vědecká bádání se orientují do oblasti informatiky a umělé inteligence, na zpracování signálů a obrazu, rozpoznávání obrazu, teorie systémů a teorie řízení.

Astronomové a astrofyzikové zkoumají tělesa a jevy od bezprostředního okolí Země až po vzdálené galaxie, jejich vznik a vývoj, a to ve všech oborech elektromagnetického spektra, od rádiového až po gama záření, zabývají se analytickými modely a počítačovými simulacemi gravitačních a magnetohydrodynamických procesů, věnují se relativistické astrofyzice – a samozřejmě planetárním soustavám, včetně naší sluneční, jejich planet i malých těles, zvláště meteoroidů a asteroidů.

Významného úspěchu s velkým mezinárodním ohlasem dosáhli pracovníci *Astronomického ústavu AV ČR*. Jeho historie se však započala před více než 20 lety. Dne 7. května 1991 asi hodinu po půlnoci letního času prořal hvězdnou oblohu velmi jasný meteor – bolid, který byl zaznamenán kamerami automatické bolidové sítě. Z analýz snímků bylo zřejmé, že musel skončit dopadem velkého množství meteoritů poblíž města Benešov (po němž bolid nese své jméno). Přesto žádný z pokusů o nalezení dopadnuvších těles nebyl korunován úspěchem. Navzdory tomu se snímky a spektra pořízená bolidovou sítí staly cenným materiálem pro výzkum srážek velkých meteoroidů se Zemí. O 20 let později však pracovníci Oddělení meziplanetární hmoty znovu, tentokrát už pomocí vylepšených metod, zpracovali snímky z bolidových kamer ze 7. května 1991, revidovali dráhu tehdejšího tělesa v atmosféře a získali opravenou předpověď oblasti dopadu meteoritů. A na jimi přesně předpovězeném místě byly skutečně po dvou desetiletích (!) nalezeny čtyři značně zvětřelé meteority o celkové hmotnosti asi 12 gramů. Tím však překvapení neskončila: následná mineralogická analýza nalezených těles totiž přinesla udivující výsledky: Zdá se, že meteorit Benešov byl slepencem velmi různorodých typů materiálu: ve čtyřech nalezených vzorcích byly s jistotou stanoveny tři různé typy – dva typy chondritů a primitivní achondrit!

Přestože zjevným úspěchem ondrejovských astronomů je už samo nalezení meteoritů dvacet let po jejich dopadu, mineralogické výsledky mají obrovský význam pro budoucí výzkumy dopadů těles. Ukazují totiž, že pro popis vlastností původního tělesa je nezbytné najít a studovat co největší množství meteoritů z daného pádu, včetně malých, gramových fragmentů.

Pavel Spurný, Jakub Haloda, Jiří Borovička, Lukáš Shrbený and Patricie Halodová: Reanalysis of the Benesov bolide and recovery of polymict breccia meteorites - old mystery solved after 20 years, A&A 570 (2014) A39.

<http://www.aanda.org/articles/aa/abs/2014/10/aa24308-14/aa24308-14.html>

Do hledání metod boje proti národovým onemocněním se zapsal *Fyzikální ústav AV ČR*: jeho badatelům se v rámci projektu „Smrt na magnetech“ podařilo prokázat, že pomocí určité konfigurace lokálního magnetického pole je možné dosáhnout apoptózy rakovinových buněk. Apoptóza neboli programovaná buněčná smrt je přirozený proces, jakým se v organismu ničí a odstraňují poškozené nebo už nepotřebné buňky. V nádorových buňkách – na rozdíl od nenádorových – je však apoptóza většinou potlačena. Fyzikové nyní ukázali možnou cestu, jak i rakovinné buňky přimět k zániku: vysoký gradient magnetického pole vytvářený mikromagnety vyvolával u jimi studovaných THP-1 nádorových buněk zvětšení objemu, zvýšení hladiny oxidačních látek v buňce, zpomalení jejich bujení a následně i buněčnou smrt. Tyto jevy se podařilo objasnit v rámci fyzikálních modelů, což otevírá zajímavý směr magnetické terapie bez použití chemických látek.

Zablotskii V, Syrovets T, Schmidt ZW, Dejneka A, Simmet T: Modulation of monocytic leukemia cell function and survival by high gradient magnetic fields and mathematical

modeling studies. Biomaterials. 2014 Mar;35(10):3164-71.
<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/24439412>

Badatelé z **Fyzikálního ústavu AV ČR** ve spolupráci s vědci z Cambridge, Nottinghamu a Mainzu též pozorovali nový fyzikální jev, který umožňuje ovládat magnet elektrickým polem. Museli k tomu opustit pole klasické fyziky a vstoupit do světa relativistické kvantové mechaniky. Einsteinova relativita totiž umožňuje, aby elektrony urychlené v elektrickém poli srovnaly své spiny, jinými slovy – aby se zmagnetovaly. Vědci vzali permanentní magnet a urychlili v přiloženém poli část elektronů uvnitř magnetu. Tyto urychlené elektrony vytvořily nový vnitřní zmagnetovaný oblak, který dokázal rozhýbat okolní permanentní magnet tak, že mohla být zaznamenána změna polohy jeho pólů. To nabízí slibné možnosti pro zápis, ukládání a čtení informace na novém principu magnetického záznamu – a tedy pro konstrukci nové generace pamětí.

H. Kurebayashi, Jairo Sinova, D. Fang, A. C. Irvine, T. D. Skinner, J. Wunderlich, V. Novák, R. P. Champion, B. L. Gallagher, E. K. Vehstedt, L. P. Zárbo, K. Výborný, A. J. Ferguson & T. Jungwirth: An antidamping spin-orbit torque originating from the Berry curvature. Nature Nanotechnology 9, 211–217 (2014).

<http://www.nature.com/nano/journal/v9/n3/full/nnano.2014.15.html#close>

V okolí některých hvězd se vyskytuje velké množství polyaromatických uhlovodíkových molekul. Původ těchto organických sloučenin v mezihvězdném prostoru zůstával nejasný, ačkoli je důležitý pro pochopení vzniku života ve vesmíru. Dosavadní teorie nenabízely uspokojivé vysvětlení, proč je jich v mezihvězdném prostoru tolik. Vědcům z **Fyzikálního ústavu AV ČR** se podařilo tuto záhadu poodhalit: Při experimentech ve fyzice povrchů, prováděných na rastrovacím tunelovacím mikroskopu, kdy studovali působení atomárního vodíku na grafen rostlý na karbidu křemíku ve vysokém vakuu a při vysokých teplotách, získali poznatky důležité i pro tento zdánlivě nesouvisející astronomický problém, takže mohli formulovat novou teorii vzniku uhlovodíkových sloučenin v mezihvězdném prostoru: Mají za to, že molekuly polyaromatických uhlovodíků se tvoří leptáním vrstev grafitu, které pokrývají povrch částic hvězdného prachu, a to prostřednictvím vodíku. Celý proces má několik fází: Nejprve se v blízkosti některých hvězd zformují zrna karbidu křemíku, který je součástí hvězdného prachu. Následně se na nich při vysokých teplotách utvoří grafen. Ve větších vzdálenostech od hvězdy dochází, vlivem přítomnosti atomárního vodíku, k adsorpci vodíku na povrch grafenu. Tento povrch se narušuje, až nakonec vznikají polyaromatické uhlovodíky.

P. Merino, M. Švec, J.I. Martinez, P. Jelinek, P. Lacovig, M. Dalmiglio, S. Lizzit, P. Soukiassian, J. Cernicharo & J.A. Martín-Gago: Graphene etching on SiC grains as a path to interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons formation. Nature Communications 5, Article number: 3054.

<http://www.nature.com/ncomms/2014/140121/ncomms4054/full/ncomms4054.html>

V **Matematickém ústavu AV ČR** dokončili projekt nazvaný „Matematické modelování procesů v hysterezních materiálech“. Uvedené materiály se podle řešitele nejvíc využívají v elektronice, ale stále víc se uplatňují třeba i ve strojírenství, například při přesném polohování mechanických součástí, nebo v medicíně. Jejich společnou charakteristikou je specifický druh paměti, která může být žádoucí (např. u paměťových médií), nebo nežádoucí (např. u piezoelektrických měničů nebo rekuperátorů energie, případně při akumulaci únavy v

cyklicky zatěžovaném materiálu). Počítačové ovládání hysterezních prvků vyžaduje přesné a spolehlivé algoritmy, které umožňují predikovat a numericky kompenzovat vliv zmíněné paměti. V rámci projektu byly navrženy matematické modely pro plastickou, magnetickou a piezoelektrickou hysterezi. Výsledky dokázaly jejich korektnost a stabilitu.
Projekt GAČR P201/10/2315 řešený v letech 2010-14, řešitel Pavel Krejčí.

Vědci v *Ústavu informatiky AV ČR* hledají postupy, jak postihnout komplikované, chaotické nebo zdánlivě náhodné děje v přírodě i ve společnosti a jak v nich najít nějaký řád. Rozvíjejí metody, které umožňují lépe pochopit dynamické děje ve složitých, stále se měnících systémech, jako je například atmosféra Země nebo lidský mozek, a tyto komplexní procesy analyzují a modelují.

Odhali tak určité příčinné vazby mezi atmosférickými procesy, které probíhají v různých časových měřítkách. Nově objevený jev meziškálových vazeb, resp. meziškálového přenosu informace v dynamice atmosféry může vysvětlit řadu teplotních odchylek od dlouhodobých normálů. Například pomalý a ve vztahu ke změnám teplot nevýrazný klimatický cyklus, jenž je ve střední Evropě svázaný s tzv. Severoatlantickou oscilací a má periodu 7–8 let, může způsobovat výraznější změny teplot v časových škálách měsíců či několika let a vyvolávat meziroční variabilitu průměrných teplot v rozsahu 1–2 °C.

Milan Paluš: Multiscale Atmospheric Dynamics: Cross-Frequency Phase-Amplitude Coupling in the Air Temperature. Phys. Rev. Lett. 112, 078702 – Published 21 February 2014.

<http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.112.078702>

Jeden z dalších projektů *Ústavu informatiky AV ČR*, řešený ve spolupráci s odborníky z ČVUT i z firem, se zaměřil na zvýšení využití parkovací kapacity na dálnicích za pomoci predikčních modelů. Byl vytvořen predikční systém obsazenosti dálničních parkovišť pro nákladní vozidla, od předpovědního modelu až po softwarové provedení a předávání online informace řidičům jedoucích vozidel v době, kdy ji mohou reálně využít. Ústav informatiky se zabýval statistickým modelováním, které je podkladem daného predikčního modelu. Vzhledem k tomu, že předpovídaná proměnná (obsazenost daného parkoviště v daném čase, tedy počet parkujících nákladních vozidel) není v reálných podmínkách přímo dostupná, šlo o nestandardní úlohu, jejíž řešení je založeno na dvoukrokovém přístupu. Nejprve byl spočten statistický odhad obsazenosti z nepřímých dat získaných z mýtného systému (anonymizované individuální časy průjezdu jednotlivých vozidel mýtnými branami). S ním pak dále pracuje (časově a prostorově nehomogenní) dynamický model GAM, v jehož konstrukci je zohledněna jak bezprostřední minulost sledovaného systému, tak jeho dlouhodobé chování. Velmi výrazné jsou vzájemně provázané, interagující denní a týdenní periodické složky. Charakter použitého modelu umožňuje kvalitní výpočty. Výsledné predikce jsou rozčleněny do intervalů obsazenosti, které jsou snadno sdělitelné řidičům během jízdy.

Projekt: Zvýšení využití parkovací kapacity na dálnicích za pomoci predikčních modelů TAČR projekt TA02031411, Doba řešení: 2012-2014

Ústav jaderné fyziky AV ČR získal nový cyklotron, který dokáže urychlit protony až na energii 24 MeV, čímž posílí možnosti ústavu zkoumat jevy důležité mimo jiné pro vývoj nových radiofarmak. Poskytuje intenzivní svazek i pro neutronové zdroje důležité ke studiu neutronových reakcí významných pro pokročilé jaderné systémy.

V tomto ústavu také vloni pokročili v prvkové charakterizaci chemicky připraveného grafenu pomocí jaderných analytických metod. Grafen je dvourozměrná modifikace uhlíku s pozoruhodnými vlastnostmi chemickými (nejreaktivnější forma uhlíku), elektrickými (vyšší vodivost než měď a stříbro při pokojové teplotě), mechanickými (vyšší pevnost než ocel) i optickými (vysoká opacita). Díky nim má předpoklady k širokému využití v elektrotechnice (například pro výrobu fotovoltaických článků nového typu), v lékařství (pro biosenzory nebo cílený přenos léčiv do buněk), při výrobě lehkých a pevných kompozitních materiálů, vysoce účinných katalyzátorů či pro uchovávání energie. Nejprve je však třeba zvládnout jeho přípravu v průmyslově významném množství. Při některých postupech však může docházet ke kontaminaci celou řadou prvků, což má za následek nežádoucí změny vlastností grafenu. Na druhé straně lze při chemické přípravě do struktury grafenu cíleně vnášet prvky, které mohou řadu procesů katalyzovat. Pracovníci **Ústavu jaderné fyziky AV ČR** využili nedestrukční jaderné analytické metody (jako neutronovou aktivační analýzu, promptní gama aktivační analýzu, protony buzenou emisi charakteristického záření X, protony buzenou emisi záření gama, Rutherfordův zpětný rozptyl) pro systematické studium míry znečištění ve vzorcích grafenu připravených několika chemickými postupy, aby určili nejvhodnější způsob přípravy. Mimo jiné ukázali možnost vytvořit chemicky zajímavý grafen s vyšším obsahem thoria a uranu a s vynikajícími vlastnostmi pro elektrokatalytickou redukci kyslíku a peroxidu vodíku.

C. H. An Wong, Z. Sofer, M. Kubešová, J. Kučera, S. Matějková, M. Pumera: *Synthetic routes contaminate graphene materials with a whole spectrum of unanticipated metallic elements. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 111 (2014) 13774–13779.*

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/25201990>

C. K. Chua, A. Ambrosi, Z. Sofer, A. Macková, V. Havránek, I. Tomandl, M. Pumera: *Chemical Preparation of Graphene Materials Results in Extensive Unintentional Doping with Heteroatoms and Metals. Chem. Eur. J., 20 (2014) 15760–15767.*

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/25284355>

Z. Sofer, O. Jankovský, P. Šimek, K. Klímová, A. Macková, M. Pumera: *Uranium- and Thorium-Doped Graphene for Efficient Oxygen and Hydrogen Peroxide Reduction. ACS Nano 8 (2014) 7106–7114.*

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/24979344>

V **Ústavu jaderné fyziky AV ČR** využili též neutronovou aktivační analýzu k výzkumu problematiky blízké českému spotřebiteli: totiž ke studiu vlivu způsobu vaření piva na koncentraci křemíku v pivech typu ležák. Křemík je v organismu nezbytný pro pevnost kostí a správnou funkci pojivových tkání. U člověka je jedním z nejvíce zastoupených stopových prvků v těle. V zažívacím traktu blokuje křemík absorpci hliníku, čímž může působit preventivně proti vzniku Alzheimerovy choroby. Křemík je obsažen v řadě potravin, zejména rostlinného původu, ale ve formě, která se v zažívacím traktu vstřebává jen málo. V pivu se však nachází v podobě rozpustné kyseliny orthokřemičité, tedy ve formě, již tělo dokáže využít. Jak ale proces vaření piva ovlivňuje výslednou koncentraci tohoto prvku? K nalezení odpovědi použili vědci neutronovou aktivační analýzu pro rozbor různých ležáků z šesti pivovarů v ČR. Zjistili, že hlavní podíl křemíku pochází ze sladovnického ječmene a přechází do piva při rmutování, jedné z počátečních fází při vaření piva. V několika druzích českých piv stanovili koncentraci křemíku v rozmezí 13,7 - 44,2 mg l⁻¹. Doporučená denní dávka pro člověka je přitom 10–25 mg.

I. Krausová, R. Cejnar, J. Kučera, P. Dostálek: *Impact of the brewing process on the concentration of silicon in lager beer.*

J. Inst. Brew. 120 (2014) 433–437; <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jib.148/abstract>

Odborníci v *Ústavu teorie informace a automatizace AV ČR* provádějí základní a aplikovaný výzkum na poli informatiky, zpracování signálů a obrazu, rozpoznávání obrazu, teorie systémů a teorie řízení. Mimo jiné vyvinuli systém pro zvýšení kvality snímků sítnice oka, které jsou klíčové pro diagnostiku poškození sítnice – retinopatie. Proměnlivost poškození však snižuje efektivitu používaných metod. Ve snímcích se předpokládá rozmazání neznámé a proměnné velikosti. Vědečtí pracovníci modelují rozmazání prostřednictvím určitého typu matematické operace – jako tzv. konvoluci s jádrem s proměnlivým tvarem pro různé části snímku. Konvoluční jádra se odhadují na základě znalosti dat. Výsledky ukazují vylepšení, které významně zvýší použitelnost takovýchto dat v klinické praxi.

Andrés G. Marrugo, María S. Millán, Michal Šorel, Filip Šroubek: Restoration of retinal images with space-variant blur; Journal of Biomedical Optics 19(1), 016023 (January 2014).“

<http://library.utia.cas.cz/separaty/2014/ZOI/sorel-0424586.pdf>

Podobně v *Ústavu teorie informace a automatizace AV ČR* vylepšili jednu z diagnostických metod nukleární medicíny – tzv. planární scintigrafii, při níž se opakovaně snímá rozložení radioaktivní látky aplikované do těla pacienta v čase. To umožňuje sledovat tvar konkrétního orgánu a jeho časovou aktivitu. Získanou sekvenci snímků vyšetřovaného orgánu je ovšem potřeba dále analyzovat. Analýzu však komplikuje vzájemný překryv jednotlivých orgánů v organismu a skutečnost, že celá sekvence snímků je silně zašuměna, takže interpretace dat významně závisí na zkušenosti lékaře. Výzkumníci vyvinuli pro analýzu dat ze scintigrafických vyšetření matematickou metodu nezávislou na lidském faktoru, díky níž se celá diagnostika významně zpřesní. Matematická metoda je založena na pravděpodobnostním modelu, jenž reflektuje dynamiku tekutin v lidském těle a zahrnuje odhad hladiny šumu a dalších nepřesností v naměřených datech.

Bayesian Blind Separation and Deconvolution of Dynamic Image Sequences Using Sparsity Tichy, O. Smidl, V.; Priors, IEEE Transactions on Medical Imaging; Volume: 34, Issue: 1.

<http://www.ieee-tmi.org/>.

Aplikovaná fyzika

Provádí se nejen základní, často interdisciplinární výzkum pevných látek, kapalin a plazmatu, ale také bádání s širokým potenciálem využití v nejrůznějších dalších oblastech vědy, techniky i běžného života.

- Ústav fotoniky a elektroniky AV ČR <http://www.ufe.cz/cs>
- Ústav fyziky materiálů AV ČR <http://www.ipm.cz/>
- Ústav fyziky plazmatu AV ČR <http://ufp.avcr.cz/>
- Ústav pro hydrodynamiku AV ČR http://www.ih.cas.cz/web_new/cs/
- Ústav přístrojové techniky AV ČR <http://www.isibrno.cz/>
- Ústav teoretické a aplikované mechaniky AV ČR <http://www.itam.cas.cz/>
- Ústav termomechaniky AV ČR <http://www.it.cas.cz/>

Výzkum v oblasti fotoniky, optoelektroniky a elektroniky zahrnuje využívání poznatků z fyziky, chemie a biologie pro vývoj nových optických biosenzorů a nových

biosenzorových technologií. Cílem výzkumů jsou i výkonové vláknové lasery a speciální optická vlákna a jejich perspektivní využití v materiálovém průmyslu, v medicíně a v optice.

Předmětem zájmu fyziků je též vztah mezi chováním a vlastnostmi rozmanitých pokročilých materiálů a jejich strukturními a mikrostrukturními charakteristikami, mechanismy únavových procesů v pokročilých kovových materiálech a kompozitech na bázi kovů i v polymerních materiálech.

Vyvíjejí, konstruují a zdokonalují se nové přístroje, zařízení a technologie pro průmyslové využití i pro lékařství, včetně například nukleární magnetické rezonance nebo měření a zpracování dat v oblasti kardiologie a neurologie.

Intenzivně se bádá i na poli mechaniky tuhé fáze, kdy převažuje zaměření na stavební konstrukce, jejich aerodynamiku, aeroelasticitu, na rozvoj nových metod posuzování stavebních materiálů a konstrukcí, stejně jako na problémy spojené se záchranou historických budov.

Odborníci zabývající se čtvrtým skupenstvím hmoty neboli plazmatem studují vlastnosti ionizovaných prostředí a laserového plazmatu, stejně jako interakci plazmatu s jinými skupenstvími hmoty. Předmětem jejich zájmu je kupříkladu i likvidace odpadů v proudu plazmatu, rozklad chemicky stabilních látek či syntéza materiálů v plazmatu.

Teoretický i experimentální výzkum se zaměřuje na mechaniku tekutin, hydrodynamiku biosféry, na studium vlastností newtonských látek, jako jsou emulze, suspenze, polymery či biomateriály, na transport látek membránou buněk. Stranou nezůstávají ani transformační procesy v hydrosféře Země, vytvářejí se modely vlivu vodního režimu půd na formování odtoku vody z půdního profilu a povodí, zjišťuje se vliv lidské činnosti a klimatu v hydrologickém cyklu povodí. Probíhá také mezioborový základní výzkum dynamiky tekutin, termodynamiky, dynamiky mechanických systémů, aerodynamiky životního prostředí či biomechaniky.

V Ústavu fotoniky a elektroniky AV ČR pokračovali ve vývoji nových, vysoce citlivých optických biosenzorů pro rychlou a citlivou detekci chemických a biologických látek v řadě společensky významných oblastí, jako jsou diagnostika v medicíně (biomarkery onemocnění), monitorování znečišťujících látek v životním prostředí (polutantů a kontaminantů) a kontrola jakosti potravin (patogenní bakterie a toxiny). V poslední době se specializují na optické biosenzory založené na speciálních elektromagnetických vlnách, tzv. povrchových plazmonech, které měří změny indexu lomu vyvolané interakcí mezi biomolekulami. To umožňuje nejen zjišťovat vybrané biomolekulární látky a určovat jejich koncentrace, ale rovněž přímo pozorovat interakce mezi molekulami a studovat jejich vlastnosti i vztahy mezi nimi. Vědci z uvedeného pracoviště Akademie věd ukázali na základě provedené teoretické analýzy, že pomocí speciálních, tzv. funkcionalizovaných kovových nanočástic lze významně zvýšit citlivost optických biosenzorů s povrchovými plazmony ke zjišťovaným molekulárním látkám. Odvodili též analytický model, který umožňuje jak předpovědět zvýšení citlivosti daných biosenzorů pomocí funkcionalizovaných kovových nanočástic, tak zároveň vybrat jejich nejvhodnější velikost a složení. Platnost svého teoretického modelu badatelé prokázali v experimentech, v nichž byly úspěšně zjištěny i nízké hladiny karcinoembryonického antigenu – což je biomarker kolorektálního karcinomu neboli molekula, jejíž koncentrace v těle je často zvýšená v důsledku vzniku a vývoje nádorových onemocnění tlustého střeva a konečníku. Uvedenou metodu je možné využít pro zvýšení účinnosti biosenzorů v celé řadě oblastí: od lékařské diagnostiky přes kontrolu kvality a nezávadnosti potravin či monitorování znečištění životního prostředí až po obranu proti biologickému terorismu.

Vědecký tým *Ústavu fotoniky a elektroniky AV ČR* ve spolupráci se společností na výrobu aktivních a pasivních komponentů pro vláknovou optiku vyvinul generátor záření pro střední infračervenou oblast. Generátor je založen na směšování signálů dvou kontinuálních úzkopásmových výkonových vláknových laserů v periodicky pólvaném nelineárním krystalu a je laditelný v rozsahu 3100–3600 nm. Tento přístroj nalezne uplatnění v metrologii a laserové spektroskopii vysokého rozlišení. V metrologii se uplatní mimo jiné při optické vektorové analýze součástí určených pro střední infračervenou oblast. Pro spektroskopii bude doplněn o mnohaprůchodovou Heriottovu celu. Ve výhledu jsou aplikace pro chemický průmysl, monitorování kvality ovzduší a lékařskou diagnostiku založenou na rozboru organických těkavých látek obsažených ve vydechovaném vzduchu. Generátor nahradí konvenční spektrální analyzátor levnějším řešením s vyšším spektrálním rozlišením a lepším odstupem signálu od šumu.

Odborníci v *Ústavu fyziky materiálů AV ČR* objasňují chování a vlastnosti různých kovových i nekovových materiálů; studují např. důsledky různých typů mechanického zatížení, včetně jejich odolnosti vůči únavě nebo rychlosti šíření únavových trhlin, zkoumají strukturu materiálů vybraných termodynamických, difuzních a magnetických vlastností.

Významnou a dlouhodobou oblastí jejich výzkumu je účast na vývoji moderních vysokoteplotních materiálů na bázi titanu a hliníku (TiAl) zkoumáním mechanismů jejich poškození. U těchto slitin se vytváří jemná lamelární mikrostruktura, která je důvodem jejich vysoké pevnosti. TiAl slitiny mají navíc nízkou hustotu, dobrou odolnost proti korozi a udržují si své vlastnosti až do teplot okolo 800 °C; jejich nevýhodou je však nízká houževnatost. Ve zmíněném ústavu byly zkoumány slitiny TiAl s 8 at.% niobu (Nb) a s různým obsahem legujících prvků molybden a uhlík (Mo a C), s cílem zjistit vliv těchto příměsí a dalšího tepelného zpracování. Ve spolupráci s *Ústavem jaderné fyziky AV ČR* byly nejdříve sestaveny části rovnovážných diagramů pro dané slitiny na základě dat získaných z neutronových difrakčních experimentů při ohřevu a chlazení. Tato data byla využita pro zvolení parametrů tepelného zpracování daných slitin. Byla tak získána jemná mikrostruktura s lamelami o tloušťce jednotek nanometrů. Měřením vlastností těchto materiálů při deformacích za podmínek podobných očekávaným provozním podmínkám a pomocí transmisní elektronové mikroskopie byly zkoumány mechanismy, které způsobují poškození a lom. Bylo zjištěno, že cyklické zatěžování způsobuje destrukci lamelární mikrostruktury již při teplotách nad 750 °C, výrazněji pak nad 800 °C. Mikrostruktura těchto materiálů tedy není při těchto teplotách dlouhodobě stabilní. Dále bylo zjištěno, že slitina s 2 at.% molybdenu a nanolamelární strukturou má lepší vlastnosti (delší únavová životnost i vyšší pevnost) než materiály bez tepelného zpracování, a to díky přítomnosti houževnaté fáze beta, kterou molybden stabilizuje.

T. Kruml, K. Obrtlík: Microstructure degradation in high temperature fatigue of TiAl alloy, Int. J. Fatigue 65 (2014), 28-32.

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142112313002831>

P. Beran, M. Petrenec, M. Heczko, B. Smetana, M. Žaludová, M. Šmíd, T. Kruml, L. Keller: In-situ neutron diffraction study of thermal phase stability in a γ -TiAl based alloy doped with Mo and/or C, Intermetallics 54 (2014), 28-38.

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0966979514001587>

Další důležitý krok na dlouhé cestě k poznání fyzikálních procesů, jejichž ovládnutí by zajistilo zcela nový, spolehlivý, bezpečný a prakticky nevyčerpatelný zdroj ekologicky šetrné energie prostřednictvím tzv. termojaderné fúze, učinili vědci v **Ústavu fyziky plazmatu AV ČR** prostřednictvím zařízení nazvaného tokamak COMPASS. V tokamacích – a v budoucích fúzních reaktorech – se plazma nesmí dotýkat stěn nádoby či reaktoru. Z toho důvodu je potřeba zjistit, jak plazma co nejlépe izolovat – jak pomocí silného magnetického pole dosáhnout co nejnižších teplot na okrajích a co nejvyšších teplot uprostřed plazmatu. Studují se turbulence a transport částic v plazmatu v tokamacích, jeho okrajové nestability a metody jejich potlačení. Poznatky získávané na tokamaku jsou klíčové pro největší experimentální zařízení pro jadernou fúzi na světě – ITER, jehož vnitřní stěna je v přímém kontaktu s plazmatem: vydržet jeho tepelný tok je nesnadný úkol. Jelikož energie teče téměř rovnoběžně s povrchem, může jeho vhodný tvar zabránit roztavení. Proto pracovníci Ústavu fyziky plazmatu provedli stovky experimentů na COMPASSu při různých parametrech plazmatu. Analýza obrazů stěny termovizní kamerou ukázala, že optimální tvar souhlasí s heuristickým modelem, což dává důvěru v jeho předpovědi pro ITER.

Pro zajištění kvality různých zpracovatelských procesů v plastikářském průmyslu (vytlačování, vstřikování, vyfukování, apod.) hraje klíčovou roli správná charakterizace vstupních polymerních materiálů. Jejich charakterizace neboli reologické chování je určováno především molekulární strukturou používaných materiálů a charakterem toku. Zde může dominovat smykové či tahové (elongační) namáhání, případně jejich kombinace. Navíc se může jednat o procesy časově ustálené či vyvíjející se v čase. Numerické modelování těchto jevů vychází z klasické rovnice kontinuity a klasických bilančních rovnic společných pro všechny materiály. Poslední vztah završující tento popis představuje tzv. konstitutivní rovnice, která charakterizuje daný materiál současně ve všech reologických aspektech. Oproti doposud známým konstitutivním vztahům byla v **Ústavu pro hydrodynamiku AV ČR** navržena nová rovnice, a to s menším počtem vstupních parametrů při současně minimálně zachované, ne-li lepší, přesnosti jednotlivých reologických charakteristik (elongační viskozita a tahová viskozita jak při ustáleném, tak neustáleném proudění, první rozdíl normálových napětí, apod.). Výhoda této nově navržené konstitutivní rovnice spočívá v tom, že redukuje vstupní parametry, aby mohly být jednoznačněji numericky určeny, a obecně vede k podstatnému zjednodušení celkového numerického schématu, přičemž zůstává zaručena kvalita predikce chování polymerních materiálů.

R. Pivokonsky, P. Filip: Predictive/fitting capabilities of differential constitutive models for polymer melts – reduction of nonlinear parameters in the eXtended Pom-Pom model; Colloid and Polymer Science; November 2014, Volume 292, Issue 11, pp 2753-2763.
<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00396-014-3308-7>

Radek Pivokonsky, Petr Filip, Jana Zelenkova: The role of the Gordon–Schowalter derivative term in the constitutive models—improved flexibility of the modified XPP model Colloid and Polymer Science, April 2015, Volume 293, Issue 4, pp 1227-1236
<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00396-015-3498-7>

Ústav přístrojové techniky AV ČR svou činností přesahuje do aplikační sféry v mnoha oborech, o čemž svědčí například lokalizační systém pro bezdrátové monitorování polohy kaloně egyptského. Představuje unikátní nástroj pro zoology, kteří sledují rozvoj populace těchto jedinečných savců. Využívá kombinaci moderních algoritmů digitálního zpracování signálů a stochastickou analýzu zaznamenaných údajů pro přesný popis migrace, hnízdění a rozmnožování těchto malých obratlovců. Lokalizační systém ve své robustní podobě byl nasazen v oblasti Středomoří a egyptské pouště.

Dalším příkladem je projekt **Bezkontaktních optických měřicích metod a systémů pro přesné strojírenství** zaměřený na výzkum a návrh optických systémů pro vysoce citlivá zařízení měřící délkové změny, tvarové úchyly a povrchové defekty, která se mohou využít v oblasti vyspělého strojírenství a pokročilých mikrotechnologií. Cílem projektu byl výzkum a vývoj kompaktních laserových interferometrických snímačů polohy a výchylky s významným podílem optovláknové techniky. Hlavním výsledkem výzkumu bylo sestavení nové měřicí metody pro velmi přesné vyhodnocení fáze interferujících laserových svazků v laserovém interferometru. Tato metoda dovoluje významným způsobem zjednodušit optickou soustavu detekčního řetězce laserového interferometru s tzv. homodynní detekcí. Nová metoda byla patentována a následně publikována v několika zahraničních časopisech s impaktním faktorem. V závěru řešení uvedeného projektu byl sestaven komplexní délkový senzor, který má v sobě začleněnu novou patentovanou metodu vyhodnocení interferenční fáze. Tento senzor je díky miniaturizaci zakomponován do těla tradičních indukčnostních snímačů délky, což předurčuje jeho budoucí využití v přesném měření, jako jsou kalibrační mosty, automatizované linky pro kontrolu součástí a metrologické přístroje. Konstrukce snímače a jeho výroba se uskutečnily ve spolupráci s průmyslovým partnerem.
Projekt UPT-046401 Bezkontaktních optické měřicí metody a systémy pro přesné strojírenství, MPO FR-TI2/705

Pro vývoj účinných technik konsolidace a preventivní konzervace porézních stavebních materiálů, včetně těch použitých v historických stavbách, je stěžejním předpokladem porozumět procesu průniku kapaliny do těchto materiálů. Chtějí-li odborníci studovat pochody uvnitř mikrostruktury materiálu, např. poměr hloubky průniku kapaliny k saturovanému objemu materiálu nebo tvar vlny, jíž se kapalina materiálem šíří, je nezbytný pohled do vnitřní struktury pevných látek – právě ten umožňují radiografické metody. V **Ústavu teoretické a aplikované mechaniky AV ČR** využili zobrazování rentgenovým zářením ke sledování průniku kapaliny porézním vápencem. Vzorky materiálu byly podrobeny mikrotomografickému měření tak, aby ze získaných dat bylo možné vypracovat mikrostrukturní model s vysokým rozlišením, vhodný pro numerickou simulaci průchodu kapaliny materiálem s použitím metody konečných prvků (výsledné rozlišení bylo 17,86 mikrometrů na pixel). Pak byl radiograficky zaznamenán průběh napouštění materiálu vodným roztokem jodu v reálném čase. Jod díky své schopnosti výrazně tlumit rentgenové paprsky posloužil jako kontrastní látka usnadňující zobrazení pronikající kapaliny. Z radiografických dat byly metodami segmentace a analýzy obrazu určeny závislosti mezi rychlostí průniku, hloubkou a objemem nasáklého materiálu. Data z mikrotomografické rekonstrukce byla využita pro parametrickou simulaci metodou konečných prvků ke zjištění rozložení rychlostí kapaliny proudící zkoumaným materiálem a pro určení tzv. efektivního Darcyho toku. Výsledky numerických simulací byly porovnány jak s výsledky radiografického zobrazování procesu penetrace v reálném čase, tak s výsledky přímého měření nasákavosti mikrotrubicí – a ukázaly dobrou shodu. Model tak umožňuje přesněji interpretovat terénní měření nasákavosti mikrotrubicí na historických stavbách.
Koudelka_ml., Petr; Jandejsek, Ivan; Doktor, Tomáš; Kytýř, Daniel; Jiroušek, Ondřej; Zíma, Pavel; Drdácký, Miloš: Radiographical investigation of fluid penetration processes in natural stones used in historical buildings. Journal of Instrumentation 2014, roč. 9, č. 5, c05040.

<http://iopscience.iop.org/1748-0221/9/05/C05040>

Obrázek: Vizualizace rozdělení rychlosti proudění ve vzorku maastrichtského vápence vytvořená na základě simulace metodou konečných prvků

Obrázek: Srovnání tvaru vlny ve vzorcích různých tvarů – vzorek šířky 10 mm (vlevo), vzorek šířky 30 mm (vpravo). Přímé zobrazení rentgenovým zářením. zdroj: P. Koudelka

V *Ústavu teoretické a aplikované mechaniky AV ČR* také posuzovali vliv přísady lněného oleje do vápenné a vápeno-metakaolinové malty na jejich trvanlivost se záměrem využít tyto malty při konzervaci stavebních památek. Výzkum prokázal, že přidavek oleje do vápenné nebo vápeno-metakaolinové malty zlepšuje její odolnost vůči poškození krystalizačními cykly chloridu sodného.

Fascinující obrázky vegetace zalité v ledu a výpadek elektrické trakce v Česku v prosinci 2014 byly důsledkem neobvyklého deště metastabilní podchlazené vody, tedy vody, která zůstává kapalná při teplotě nižší, než je rovnovážná teplota tání ledu. Podchlazená voda se běžně vyskytuje v oblacích. Její důležitou vlastností je povrchové napětí, které vstupuje do termodynamických, transportních a dynamických procesů, jako je např. dopad a mrznutí podchlazených kapek na površích. Kapalná voda je známá anomálními závislostmi hustoty, stlačitelnosti a isobarické tepelné kapacity na teplotě. Také u povrchového napětí byla předpokládána anomální teplotní závislost: starší experimentální data a některé teoretické modely ukazovaly, že při snižování teploty roste povrchové napětí metastabilní podchlazené vody výrazně rychleji, než je tomu u stabilní kapalně vody, což by znamenalo existenci inflexního bodu v blízkosti 0 °C. V *Ústavu termomechaniky AV ČR* a na Západočeské univerzitě byly vyvinuty speciální aparatury založené na modifikované metodě kapilární elevace, které umožnily rychle měnit teplotu pro dosažení hlubokého podchlazení při zachování vysoké přesnosti měření. Oba nezávislé experimenty přesvědčivě vyloučily předpokládanou anomálii: měřená data povrchového napětí leží na hladké křivce, která nevykazuje výrazné změny sklonu ani křivosti mezi -25 °C a +20 °C. Výsledky budou využity pro novou korelaci povrchového napětí vody, která bude zpracována i jako dokument Mezinárodní asociace pro vlastnosti vody a vodní páry (IAPWS).

Hrubý, Jan; Vinš, Václav; Mareš, R; Hykl, Jiří; Kalová, J.: Surface Tension of Supercooled Water: No Inflection Point down to -25 degrees C.

Journal of Physical Chemistry Letters. Roč. 5, č. 3 (2014), s. 425-428. ISSN 1948-7185

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jz402571a>

Obrázek: Povrchové napětí podchlazené vody.

Experimentálně určená závislost povrchového napětí podchlazené vody na teplotě ve srovnání se staršími daty ukazujícími na anomálii. V pozadí větvičky obalené čirým ledem po dešti podchlazené vody 2. 12. 2014 v Praze.

Vědy o Zemi

Zahrnují naši planetu, její složení, strukturu a vývoj, globální, kontinentální i regionální geologické, geofyzikální a klimatické procesy a proměny v dávné i nedávné geologické minulosti.

- Geofyzikální ústav AV ČR

<http://www.ig.cas.cz/>

- Geologický ústav AV ČR <https://www.gli.cas.cz/>
- Ústav fyziky atmosféry AV ČR <http://www.ufa.cas.cz/>
- Ústav geoniky AV ČR <http://www.ugn.cas.cz/>
- Ústav struktury a mechaniky hornin AV ČR <https://www.irms.cas.cz/>

Odborníci na těchto pracovištích provádějí základní výzkum fyziky Země: stavby zemské kůry a litosféry, geodynamický vývoj, studují seizmickou aktivitu, fyzikální procesy v zemětřeseném ohnisku, zemětřesené roje a jejich spouštěcí mechanismy v různých tektonických prostředích, včetně Českého masivu, šíření seizmických vln ve složitých prostředích. Orientují se i na studium geologických procesů, paleomagnetismu, zjišťování základních paleomagnetických charakteristik hornin, studium magnetické mineralogie a magnetostratigrafie, na změny prostředí v nejmladší geologické minulosti a jejich příčiny.

Environmentální geochemie a geologie se zaměřuje mj. na studium dynamiky chemických prvků v životním prostředí. Intenzivně se zkoumají procesy v zemské kůře indukované lidskou činností a jejich účinky na životní prostředí. Studují se netradiční způsoby využívání zemské kůry, včetně ovlivňování horninových vlastností či speciálních způsobů ukládání odpadů, stejně jako procesy působící na chování, vývoj a stabilitu hornin v jejich přirozeném uložení v zemské kůře, tektonické a seismotektonické pohyby, stabilita svahů a sesuvy. Předmětem zájmu jsou i vybraná ložiska nerostných surovin a možnosti jejich využití i vývoj materiálů z netradičních prekurzorů za tvorby biomateriálů, žáruvzdorných, stavebních, konstrukčních a sorpčních materiálů.

Významné pole výzkumu představuje atmosféra Země v celém jejím rozsahu – od nejnižší troposféry až po exosféru. Pomocí experimentálních a teoretických metod včetně numerických simulací se studují dlouhodobé změny atmosférické cirkulace, děje v ionosféře i magnetosféře Země, ale i vztahy Slunce-Země. Badatelé se věnují také monitorovacím a speciálním měřením dějů v atmosféře, vyhodnocování dat a jejich předávání do světových datových sítí a databází.

Zajímavé poznatky přinesla v *Geofyzikálním ústavu AV ČR* analýza již třetího podzemního nukleárního výbuchu, který provedla Severní Korea, a to dne 12. 2. 2013 v severovýchodní hornaté části země. Měl sílu přibližně 8 až 13 kilotun trinitrotoluenu (TNT) a dosáhl seizmických účinků odpovídajících velikosti 5,1 RichtEROVY škály. Zaznamenaly ho takřka všechny seizmické stanice na světě a stal se tak jednou z nejlépe dokumentovaných nukleárních explozí v historii. Obdobně jako u dalších nukleárních explozí odpálených v minulosti v Nevadě, Kazachstánu nebo Číně, bylo vyzářené seizmické vlnové pole korejské nukleární exploze významně nesymetrické. Analýza polarizace seizmických vln prokázala, že vlnové pole obsahovalo tzv. SH vlny a Loveho vlny. Ty nemohou být vyzařovány klasickým sféricky symetrickým explozivním zdrojem, ale jsou naopak charakteristickým projevem tektonických zemětřesení. Jejich přítomnost by tak naznačovala, že nukleární exploze způsobila následné zemětřesení. Detailní výzkum však prokázal, že Loveho vlny nesouvisí s případným zemětřesením, které by bylo explozí spuštěno, ale mají zde spíše původ v silném tektonickém napětí v horninovém masivu v místě odpalu. Pravděpodobně v jeho důsledku exploze nevytvořila prudce expandující sféricky symetrickou dutinu, ale spíše dutinu ve tvaru elipsoidu. Vyzářené vlnové pole nebylo proto všesměrné, ale směrově závislé. Tuto hypotézu potvrzuje fakt, že orientace směrově závislého vyzařování velmi dobře souhlasí s orientací tektonického napětí na

Korejském poloostrově. Taktéž tomu nasvědčuje porovnání vlnových obrazů a polarizace vln severokorejských nukleárních explozí z roku 2013 a 2009. Takřka identické vlnové obrazy obou explozí vylučují přítomnost náhodného a složitého procesu, jakým je tektonické zemětřesení.

Vavryčuk, V.; Kim, S.G.: *Nonisotropic radiation of the 2013 North Korean nuclear explosion*, *Geophysical Research Letters*, 41, 2014.

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/2014GL061265/abstract>

Paleomagnetickým a paleogeografickým výzkumem získali vědci v **Geologickém ústavu AV ČR** údaje, které potvrzují, že pražská pánev (střední Čechy) byla kontinentální riftovou pánví, která se nacházela na mikrodesce Perunica. Tato mikrodeska putovala v jižních subtropických paleošířkách 24° v období pozdního siluru a byla v průběhu variského vrásnění (devon-karbon) rotována buď 170° proti směru, nebo 190° ve směru otáčení hodinových ručiček.

Obrázek: Paleogeografická poloha litosférické mikrodesky Perunica v období siluru na jižní polokouli. Mikrodeska Perunica se nacházela v jižních subtropických paleošířkách 24° v období pozdního siluru a byla v průběhu variského vrásnění otočená buď 170° proti směru, nebo 190° ve směru otáčení hodinových ručiček.

Geologové z **Geologického ústavu AV ČR, Ústavu struktury a mechaniky hornin AV ČR** a z Přírodovědecké fakulty UK odhalili pomocí fyzikálního i numerického modelování a terénním pozorováním uzamčených pískovců (jejich zrna drží pohromadě nikoli tmel, ale to, že do sebe zapadají téměř jako zámková dlažba) a písků dosud nedoložený mechanismus, který vysvětluje vznik mohutných skalních bran, věží, sloupů, převisů a dalších neuvěřitelných skalních útvarů v pískovci. Výpočty i experimenty jasně dokládají, že zde – na rozdíl od původních představ – nepůsobí pouze erozní procesy, jako krystalizace solí, mrznutí vody, dopad dešťových kapek či tekoucí voda, ale zásadní vliv má gravitačně generované tlakové pole: pískovcová skála je propojena v jeden celek tlakovým polem vytvářeným vzájemně se dotýkajícími zrny a zatížením, jehož zdrojem je hmota skály a gravitační pole. Právě toto gravitačně generované tlakové pole řídí rozpad pískovce. Pokusy prokázaly, že rychlost eroze i zvětrání se s rostoucím stlačením zpomaluje. Tam, kde je stlačení nízké, postupuje eroze rychleji, tam, kde je stlačení vyšší, je eroze mnohem pomalejší. Plošné diskontinuity (tedy přerušování a usměrnění tlakového pole) v pískovci a zmíněná negativní zpětná vazba mezi tlakem a zvětráváním (erozí) pak představují dostatečné podmínky pro vznik pozoruhodných pískovcových útvarů. Rozmanitost skalních tvarů v pískovci tudíž není výsledkem rozdílného mechanismu vzniku, ale pouze odlišnou počáteční situací ve skalních masivech: ty se liší orientací a množstvím puklin, a tím i tlakovým polem.

Jiri Bruthans, Jan Soukup, Jana Vaculikova, Michal Filippi, Jana Schweigstillova, Alan L. Mayo, David Masin, Gunther Kletetschka, Jaroslav Rihosek: *Sandstone landforms shaped by negative feedback between stress and erosion*. *Nature Geoscience* 7, 597–601 (2014).

<http://www.nature.com/ngeo/journal/v7/n8/full/ngeo2209.html>

Obrázek: AB – z ústavů

Souvislost mezi teplotními extrémami a nárůstem úmrtnosti na kardiovaskulární onemocnění potvrdila již řada studií, málo z nich se však zabývalo možnými rozdíly v působení těchto extrémů na akutní a chronická onemocnění. Právě na tento aspekt se

zaměřili vědci v *Ústavu fyziky atmosféry AV ČR*: Analyzovali vliv horkých a studených vln na úmrtnost na ischemickou chorobu srdeční (IHD) v populaci České republiky, se zaměřením na akutní infarkt myokardu a chronickou IHD. Zjistili, že za nárůst úmrtnosti v horkých vlnách byla zodpovědná především chronická IHD, a to u mužů i u žen; výrazný nárůst počtu úmrtí na chronickou ischemickou chorobu srdeční ve spojení s horkem byl zaznamenán zejména v populaci starší 65 let. Zvýšení úmrtnosti na akutní infarkt myokardu bylo ve srovnání s chronickou IHD výrazně nižší. Studené vlny byly naopak provázeny významným zvýšením úmrtnosti i v mladší populaci (0-64 let), přičemž dominantní byl nárůst počtu úmrtí na akutní infarkt myokardu.

Výsledky tedy ukazují, že zatímco zvýšení úmrtnosti na IHD v období horkých vln se týká převážně osob starších a chronicky nemocných, jejichž zdravotní stav byl zhoršen už před nástupem horkého období, fyziologické změny vyvolané chladovým stresem vedou spíše k akutnímu infarktu myokardu a vliv chladu je významný i v mladší populaci. Nejvíce ohrožené skupiny populace a nejvíce ovlivněná kardiovaskulární onemocnění se tedy pro období horkých a studených vln výrazně liší. Zohlednění těchto rozdílů při plánování a provádění preventivních opatření tak může přispět k minimalizaci zdravotních rizik působených teplotními extrémami.

Hana Davidková, Eva Plavcová, Jan Kynčl, Jan Kyselý: Impacts of hot and cold spells differ for acute and chronic ischaemic heart diseases

BMC Public Health 2014, 14:480. <http://www.biomedcentral.com/1471-2458/14/480>

Pracovníci *Ústavu fyziky atmosféry AV ČR* také vyvinuli model METRo-CZ pro předpověď teploty a stavu povrchu komunikací v zimním období. Model je založen na výpočtu tepelné a vodní bilance povrchu vozovky. Využívá aktuální poznatky, dostupná data a je přizpůsoben podmínkám České republiky. Ve spolupráci s Českým hydrometeorologickým ústavem vědeckí pracovníci vytvořili a poloprovozně aplikovali předpovědní linku, která umožní optimalizovat rozhodování dispečerů zimní údržby komunikací.

Pro nalezení východisek mnoha geotechnických a environmentálních problémů je důležitý rozvoj numerických metod k řešení úloh proudění v porézním prostředí. Výsledky, kterých v tomto směru dosáhli odborníci z *Ústavu geoniky AV ČR*, se týkají tvorby modelů pro studium efektivity těsnících prvků na bázi bentonitu, a to pomocí nových postupů, jako je využití retenční závislosti na saturaci i na stupni kompaktifikace bentonitu.

Řeší se zde také mezinárodní projekt DECOVALEX, jehož odborná témata souvisí především s potřebou modelovat příslušné procesy pro bezpečné projektování hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva. Získané výsledky jsou ale významné i pro další nové technologie využití zemské kůry, jako je podzemní ukládání nežádoucího CO₂, získávání geotermální energie, akumulace energie z obnovitelných zdrojů v případech energetického přebytku apod. V současném období Decovalex 2012–2015 se Ústav geoniky podílí na řešení úloh z oblasti hydromechaniky souvisejících s modelováním procesů bobtnání a těsnění zátky pro utěsnění prostor hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva.

Postup hornické činnosti do větších hloubek je spojen s vyššími horninovými tlaky a vysokými teplotami, což s sebou přináší vyšší bezpečnostní rizika. Pro úspěšné a bezpečné zvládnutí těchto náročných podmínek je nezbytná znalost horninového masivu, jeho vlastností, nových technologií a postupů. Proto byl v rámci Programu bezpečnostního výzkumu České republiky vypsán projekt, který řešil *Ústav geoniky AV ČR* s průmyslovým

partnerem. Zaměřoval se na zvýšení statické a dynamické stability důlních děl při těžbě uhlí ve velkých hloubkách a na optimalizaci procesu větrání a klimatizace důlních pracovišť. Práce v oblasti stability zahrnovaly shromáždění dostupných podkladů o horninovém prostředí a o technologii dobývání, včetně doplnění dat experimentálním měřením v laboratoři a v podmínkách in situ. Na základě získaných podkladů byl vytvořen fyzikální model horninového prostředí v uvažovaných hloubkách. V další fázi projektu odborníci analyzovali vývoj parametrů důlních děl v posledních desetiletích a prognózovali parametry výztuží v podmínkách ČR. Zásadním prvkem řešení je využití numerických modelů a ověření jejich funkčnosti v důlní praxi. K tomu byl nezbytný také důkladný experimentální výzkum vstupních parametrů (materiálové konstanty apod.). Na základě experimentálních údajů a jejich vyhodnocení byly vypracovány příslušné metodické postupy pro zabezpečení stability důlních děl ve velkých hloubkách.

Samostatnou část projektu tvořila oblast výzkumu teplot horninového masivu na důlních pracovištích ve velkých hloubkách s cílem vytvořit model teplotních polí. Výsledkem je zpracování 3D mapy teplotních polí ostravsko-karvinského revíru v hloubkách kolem 1000 m a využití poznatků pro vypracování bezpečnostní metodiky pod názvem **Metodické postupy vedení důlních děl a zásahů báňské záchranné služby ve ztížených mikroklimatických podmínkách.**

Projekt: VG20102014034 - Bezpečnostní aspekty vedení báňských děl v hloubkách 800 m a větších (2010-2014, MV0/VG), koordinátor Ústav geoniky AV ČR, řešitel Ing. Petr Koníček, Ph.D.

Obrázek: Deformovaná výztuž důlní chodby s vyraženými podpěrami (vlevo), stabilní oblouková výztuž důlní chodby na černouhelném dole odolné proti horninovým tlakům (uprostřed) a ukázka numerického modelu rozložení napětí kolem profilu důlní chodby (vpravo)

Radioaktivní působení vede ke změnám ve složení a vlastnostech uhlí, podobně jako tepelné působení nebo tektonické a hydrotermální aktivity. V této souvislosti byly v **Ústavu struktury a mechaniky hornin AV ČR** zkoumány vzorky uhlí z terciérních ložisek v západních Čechách (lokalita Odeř, okres Karlovy Vary) a na severní Moravě (lokalita Uhelná, okres Jeseník), v nichž obsah uranu dosahoval až 60 878 ppm, což je až 50násobek průměrných koncentrací uranu nacházejících se v uhlí. Anomální obsah uranu v uhlí lze spojit nejen s jeho minerální frakcí, ale také s organickou hmotou, která sorpčními a komplexačními ději reaguje s uranylovým kationtem, což je spojeno s dehydrogenací a oxidací organické hmoty uhlí. U studovaných vzorků uhlí byly identifikovány výrazné změny ve struktuře organické hmoty, provázené zvýšením odraznosti světla se vzrůstajícím obsahem uranu a zvýšením stupně prouhelnění. O výrazné přeměně uhlí v důsledku zvyšující se koncentrace uranu svědčí také stoupající obsah porézního polokoksu, který vznikl částečným odplyněním macerálů huminitu a liptinitu. Strukturní změny byly nerovnoměrně rozptýleny v celé struktuře uhlí, převážně ale v těsné blízkosti minerální fáze, v níž byly elektronovým mikroskopem identifikovány uranové minerály uranit a ningyoit. Účinky vysoké koncentrace uranu na organickou hmotu uhlí jsou podobné změnám, ke kterým dochází při tepelné degradaci: snižuje se extrahovatelnost a rozmanitost uhlovodíků v extraktu, dochází k vymizení typických organických sloučenin, tzv. biomarkerů, které jsou pozůstatkem původní vegetace, zvyšuje se aromaticita a stupeň kondenzace, degradaci organické hmoty doprovází i neobvyklá distribuce *n*-alkanů a alkylovaných aromatických uhlovodíků. Studium změn ve struktuře uhlí obohaceného uranem je významné pro

geologický průzkum i při využití uhlí pro výrobu elektrické energie a tepla, zplyňování a v chemickém průmyslu.

Havelcová, Martina; Machovič, Vladimír ; Mizera, Jiří; Sýkorová, Ivana; Borecká, Lenka; Kopecký, L.: A multi-instrumental geochemical study of anomalous uranium enrichment in coal. Journal of Environmental Radioactivity 2014.

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/24998749>

Předmětem výzkumů *Ústavu struktury a mechaniky hornin AV ČR* byly též velké pozdně pleistocenní sesuvy z okrajového svahu flyšových Karpat. Poprvé byl objektivně identifikován skutečný plošný rozsah akumulací hluboce založeného sesuvu, které daleko překročily běžně používané morfologicky identifikované hranice. Jedná se v Evropě o jednu z nejstarších dokumentovaných svahových deformací (cca 55 tis. let). Při výzkumu bylo využito inovativních metod, včetně extrémně dlouhého geofyzikálního profilu a podrobné dokumentace, analýz materiálu a datování odkryvu v zářezu komunikace. Výsledky slouží k praktickému vymezení nebezpečných oblastí.

Ústav struktury a mechaniky hornin AV ČR a Přírodovědecká fakulta UK v Praze také získaly společný statut Celosvětového centra excelence pro výzkum rizik ze sesuvů – je to významné ocenění dosavadních výsledků dlouhodobého společného výzkumu různých typů svahových pohybů, velkých skalních řícení a dalších jevů.

II. Živá příroda a chemické vědy

Chemické vědy

Zastřešuje experimentální i teoretické výzkumy v oborech chemie fyzikální, organické, makromolekulární a analytické, stejně jako v biochemii a v oblasti chemicko-inženýrského výzkumu.

- Ústav analytické chemie AV ČR <http://www.iach.cz/>
- Ústav anorganické chemie AV ČR <http://www.iic.cas.cz/>
- Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR <http://www.jh-inst.cas.cz/www/>
- Ústav chemických procesů AV ČR <http://www.icpf.cas.cz/>
- Ústav makromolekulární chemie AV ČR <http://www.imc.cas.cz/cz/umch/>
- Ústav organické chemie a biochemie AV ČR <http://www.uochb.cz/>

Chemikové studují rozličné analytické a bioanalytické metody pro stanovení stopových koncentrací látek, zabývají se přístrojovou technikou stěžejní pro další vědní disciplíny včetně genomiky, proteomiky, biotechnologií, průmyslové činnosti a ochrany zdraví a životního prostředí. Vytvářejí a využívají pokročilé bioanalytické technologie, bádají na pomezí anorganické chemie a materiálových věd, například v oblasti kompozitních nanomateriálů na bázi grafenu s jedinečnými vlastnostmi užitečnými při ochraně životního prostředí, provádějí výzkum pro výrobu multifunkčního fotoaktivního nanokompozitu využitelného ve stavebnictví a nátěrových hmotách. K použití v praxi směřuje například i práce odborníků na chemické procesy týkající se nových produktů pro komplexní ochranu

rostlin založených na využití přírodních látek, ale také biorafinací, tedy využití biomasy na různé tržní produkty a energii, nebo nových technologií rafinace spalin pro malé a mobilní jednotky pro tepelnou degradaci odpadu.

Fyzikální chemikové se soustředí na výzkum struktury a dynamiky látek a mechanismů reakcí v plynné, kapalně a pevné fázi a na jejich rozhraních, především v systémech významných pro chemickou katalýzu, elektrochemické a biologické procesy včetně přípravy a charakterizace nových speciálních materiálů. Například v biofyzikální chemii se věnují vývoji nových fluorescenčních metod a jejich využití ve výzkumu struktury, funkce a dynamiky biomembrán. Vyvíjejí nanomateriály a nanotechnologie se stále širším využitím v chemické katalýze, fotokatalýze a elektrochemii, ale také jako adsorbenty, membrány, senzory, samočisticí a ochranné materiály aj.

Mezi hlavní směry bádání makromolekulárních chemiků patří biomakromolekulární systémy zahrnující polymerní nosiče léčiv, dále polymerní vrstvené systémy pro kontakt s biologickým prostředím, bioanalogické polymery, hydrogely atd. Věnují se i dynamice a samoorganizaci molekulárních a nadmolekulárních polymerních útvarů, přípravě, charakterizaci a využití nových polymerních systémů s řízenou strukturou a vlastnostmi apod.

V posledním desetiletí se do popředí zájmu dostávají nanotechnologické postupy umožňující přípravu materiálů s velmi zajímavými vlastnostmi. Příprava nanostrukturovaných povrchů se obvykle spojuje s použitím řady fyzikálně-chemických procesů využívajících nebezpečné chemikálie. Typickým příkladem je vakuové naprašování s následným leptáním v kyselých nebo zásaditých lázních či využití chemických reakcí v plazmatických výbojích. Během těchto procesů se pro oplach materiálů mezi jednotlivými kroky používá voda, jež je považovaná za zcela inertní rozpouštědlo. Vlastnosti vody však velmi závisí na její teplotě a tlaku. Například hydrofobní látky, které jsou ve vodě zcela nerozpustné, se mohou při zvýšeném tlaku a teplotě ve vodě beze zbytku rozpustit. Při ještě vyšších teplotách a tlacích lze ve vodě rozpustit řadu jinak velmi odolných materiálů. To je dobře známo v geologii: Působením horké a stlačené vody vznikla v zemských hloubkách řada nerostů. V *Ústavu analytické chemie AV ČR* zkoumali šetrnou metodu povrchové úpravy skla a taveného křemene s využitím superkritické vody (což je voda o tlaku a teplotě nad tzv. kritický bod, kdy dochází k intenzivním změnám v jejích fyzikálně-chemických vlastnostech) při vývoji analytických separačních zařízení. Vyvinuli unikátní zařízení umožňující dosáhnout v laboratoři podmínky, jaké panují v geologických hloubkách. Na tomto zařízení byly následně vyvinuty zajímavé metody pro cílenou nanostrukturovanou úpravu povrchových vlastností skla a křemene využitelné v analytické chemii a mikrofluidice.

mj.: P. Karásek, J. Grym, M. Roth, J. Planeta, F. Foret. Etching of glass microchips with supercritical water. Lab Chip. 2015 Jan 7;15(1):311-8.

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/25372151>

Obrázek: Různé typy povrchu skla dosažené leptáním pomocí sub- a superkritické vody (SCW) – nahoře. Skleněná trubička se po leptání SCW změní v porézní materiál – vlevo dole. Mikrokanálek (100 x 50 mikrometrů) uvnitř skleněného čipu vyleptaný SCW.

V *Ústavu analytické chemie AV ČR* byla taktéž vypracována a popsána nová metodika elektromembránových extrakcí přes volné kapalně membrány (FLM). FLM jsou

při použití stabilní a jejich rozměry jsou snadno měřitelné a nastavitelné, stejně jako např. jejich tvar. FLM umožňují selektivní mikro-extrakce analytů ze surových biologických vzorků a prekoncentraci analytů. Extrakční proces je možné vizuálně monitorovat v reálném čase, a FLM tak mohou usnadnit pochopení základního principu elektromembránových extrakcí přes kapalnou membránu.

Vědci z Oddělení materiálové chemie *Ústavu anorganické chemie AVČR* našli novou metodu přípravy nanodestiček oxidu zinečnatého (ZnO). Jejich tloušťka je 0,6 nm, což představuje tři vrstvy atomů zinku a kyslíku uložené na sobě. Příprava nanodestiček vychází z vrstevnatého hydroxidu zinečnatého. Jde o materiál, který se skládá z vrstev hydroxidu zinečnatého nanometrové tloušťky poskládaných na sobě; prostor mezi nimi je vyplněn záporně nabitými molekulami. Vědci objevili metodu, jak hydroxidové nanodestičky od sebe oddělit (proces se nazývá delaminace) a jak je převést na nanodestičky ZnO. Takto nanokrystalický ZnO se nedal doposud připravit. Nanodestičky lze – podobně jako dlaždice – pravidelně uspořádat na površích rovných materiálů ve formě transparentních filmů nanometrových tlouštěk. Tyto filmy se dají připravit běžnými metodami, avšak výhodou nového postupu je použitelnost ZnO jako „inkoustu“ v tiskárně a následná možnost tištění jemných vzorů i velkých ploch. Proč je právě ZnO tak zajímavý? Jde totiž o polovodič, na jehož površích dochází k rozkladu organických polutantů vlivem ultrafialového záření (jev se nazývá fotokatalýza). Vědci ukázali, že tyto filmy rozkládají organické znečišťující látky (polutanty) účinněji než běžně používané nanočástice ZnO. Nanodestičky ZnO jsou vhodné pro vývoj baktericidních povrchů a nových technologií pro čištění vzduchu a vody.

J. Hynek, V. Kalousek, R. Žouželka, P. Bezdička, P. Dzik, J. Rathouský, J. Demel, K. Lang: High photocatalytic activity of transparent films composed of ZnO nanosheets. Langmuir 30 (2014) 380-386. DOI: 10.1021/la404017q.

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/la404017q>

J. Demel, J. Hynek, P. Kovář, Y. Dai, C. Taviot-Guého, O. Demel, M. Pospíšil, K.

Lang: Insight into the Structure of Layered Zinc Hydroxide Salts Intercalated with Dodecyl Sulfate Anions. J Phys. Chem. C 118 (2014) 27131-27141.

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp508499g>

V *Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR* vznikla práce, kterou panel editorů prestižního mezinárodního vědeckého časopisu PNAS (Proceedings of the National Academy of Sciences), kde byla publikována, vybral jako výsledek mimořádného významu: Tým ze zmíněného ústavu spolu s kolegy z *Biofyzikálního ústavu AV ČR* přispěl k řešení jedné z fundamentálních otázek současné vědy: jak vznikly biologické látky na Zemi či ve vesmíru. Badatelé experimentálně prokázali, že stavební kameny živých struktur, které se na Zemi objevily před asi 4–3,85 miliardy let, během období silného bombardování povrchu Země mimozemskými tělesy, mohly vzniknout z molekuly formamidu, přičemž zdrojem energie pro takovou energeticky náročnou syntézu biomolekul byly právě impakty (dopady) asteroidů. Vysoké teploty a hustoty energie vznikající při těchto impaktech vědci experimentálně napodobili za pomoci vysoce výkonného laseru PALS dielektrickým průrazem v inertním plynném médiu, kterému byl vystaven formamid v přítomnosti různých minerálů. Výsledky ukazují, že stabilní, avšak vysoce reaktivní radikály CN a NH reagují s mateřskou molekulou formamidu za vzniku celé řady meziproductů, které nakonec vedou až ke vzniku všech základních součástí nukleových kyselin, tzv. nukleových bází, které tvoří kód k zápisu genetické informace: adeninu, guaninu, thyminu, uracilu a cytosinu. Vůbec poprvé se tak podařilo v jednom reakčním systému syntetizovat všechny základní nukleové

báze. Tím se otevřel prostor pro navazující výzkum **Biofyzikálního ústavu AV ČR** (viz podkapitola Biologické a lékařské vědy).

Martin Ferus, David Nesvorný, Jiří Šponer, Petr Kubelík, Regina Michalčíková, Violetta Shestivská, Judit E. Šponer, Svatopluk Civiš: High-energy chemistry of formamide: A unified mechanism of nucleobase formation, PNAS vol. 112 no. 3, 657–662, <http://www.pnas.org/content/112/3/657.abstract>

Skupina vědců z **Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, Ústavu experimentální biologie AV ČR**, Masarykovy univerzity a dalších institucí experimentálně prokázala, že funkci enzymů ovlivňuje nejen jejich struktura, jak se dříve soudilo, ale že pro katalytické vlastnosti některých enzymů (minimálně těch použitých v daném výzkumu) je zásadní i jejich dynamika a interakce s okolní vodou. Podrobný popis enzymů jakožto látek, které určují povahu i rychlost chemických reakcí a řídí většinu biochemických procesů v živých organismech, má zásadní význam pro vytváření biologických katalyzátorů pro účely průmyslu, zemědělství, potravinářství i ochrany životního prostředí.

V **Ústavu chemických procesů AV ČR** ukončili v roce 2014 projekt, jehož cílem bylo navrhnout a odzkoušet technologie umožňující odstranění endokrinních disruptorů z odpadních a pitných vod. Endokrinními disruptory se nazývá skupina různorodých sloučenin uvolňujících se z různých plastů, změkčovadel, insekticidů, fungicidů, léčiv či hormonální antikoncepce, které, pokud se vyskytují v životním prostředí, blokují hormonální signály obratlovců, čímž mohou závažně narušovat fungování organismu. Tyto látky se v současnosti vyskytují v životním prostředí běžně: Jelikož se obtížně odbourávají biologicky, nejsou dostatečně odstraňovány čistírnami odpadních vod (ČOV). I jejich nízké koncentrace však nepříznivě ovlivňují zdravý vývoj a reprodukci vyšších organismů. V rámci zmíněného projektu byl navržen a vyvinut způsob odstranění těchto nežádoucích látek ve vodách pomocí fotokatalytické oxidace a biologických procesů. Řešitelé vyvinuli a patentovali pilotní fotokatalytický reaktor s pracovní kapacitou do 500 l/h, jenž byl instalován přímo na lokalitě ČOV a úspěšně otestován na reálných vodách vytékajících z ČOV obsahujících různorodé endokrinní disruptory s účinností nad 95 %. Se stejnou úspěšností byly pomocí fotokatalytického reaktoru vyčištěny i různé oplachové vody z farmaceutického provozu či odpadní vody z chemických výroby.

Patent: Kaštánek F., Šolcová O., Maléterová Y., Spáčilová L., Maternová H., Mašín P., Žebrák R.: Zařízení pro fotokatalytickou dekontaminaci vod s obsahem organických látek, zejména endokrinních disruptorů. (Czech) Device for Photo-Catalytic Decontamination of Water Containing Organic Compounds, Especially Endocrine Disruptors. Pat. No. PV 2013-522.

Spáčilová L., Maléterová Y., Morozová M., Kaštánek F., Dragounová P., Matejkova M., Mašín P., Ezechias M., Kresinova Z., Šolcová O.: Wastewater Treatment on Photocatalytic Pilot Plant Unit. (Eng) Res. Chem. Intermed., accepted (2014).



Obrázek: Vnitřní uspořádání provozního kontejneru zdroj: Šolcová

Základní výzkum prováděný v *Ústavu makromolekulární chemie AV ČR* a zaměřený na studium vztahu mezi strukturou a vlastnostmi makromolekulárních látek (polymerů) vyústil ve vývoj polymerních terapeutik určených především pro léčbu nádorových onemocnění a využívajících vodorozpustné polymery jako nosiče léčiv. Polymerní nosiče léčiv jsou navrženy a syntetizovány na bázi HPMA kopolymeru a umožňují cíleně dopravit v neaktivní (netoxické) formě široké spektrum kancerostatik a dalších biologicky aktivních látek (taxoly, pirarubicin, doxorubicin, porfyriny) do nádorů anebo i přímo do nádorových buněk. Léčivá látka (cytostatikum) se teprve až v nádoru nebo v nádorových buňkách uvolní v aktivní cytotoxické formě, tudíž začne působit až v nádoru nebo v nádorových buňkách, aniž by ovlivňovala zdravé části organismu. Polymerní nosiče mohou účinně dopravovat cytostatika nejen do pevných nádorů, ale po připojení směřujících struktur i do vznikajících metastáz, popřípadě do samostatných nádorových buněk. Protože jsou polymerní nosičové systémy vyvíjeny jako univerzální, je možné je využít i k cílené dopravě velkých molekul (siRNA, oligonukleotidy, DNA plasmidy) při genové terapii. Při použití polymerních terapeutik k léčbě zvířecích modelů bylo prokázáno, že polymerní nosič umožňuje významně zvýšit koncentraci dopravovaných kancerostatik v pevných nádorech bez projevů vedlejších účinků na zdravou tkáň a tím dosáhnout vysoké účinnosti léčby modelových nádorů *in vivo* u myši a krysa (lymfom EL4, 4T1, sarkom S-180, autochtonní nádor prsu a kolorektální nádor). Současně probíhající experimentální léčba terminálních pacientů (léčba ze soucitu) probíhající na základě zvláštního povolení v Japonsku potvrzuje, že výsledky získané na zvířecích modelech jsou podobné i u lidských pacientů.

Výsledky byly zveřejněny v řadě publikací; v posledních letech byla pro tento výzkum nejvýznamnější podpora ve formě Akademické prémie udělené prof. Karlovi Ulbrichovi v roce 2008, která končila v loňském roce.

Chemikové v *Ústavu makromolekulární chemie AV ČR* také potvrdili možnost přípravy biosenzoru, který přímo odhaluje infekci v sérech pacientů. Povrch SPR optického čipu (tj. senzorový čip využívající rezonanci povrchových plazmonů) pokryli uspořádanými a k povrchu zakotvenými polymerními řetězci, které brání nespecifické depozici plazmatických proteinů. Na polymer pak byly navázány bioreceptory (protilátky nebo antigeny) zachycující biomarkery specifické pro sledované onemocnění. Modelovým biosenzorem se následně podařilo detekovat různá stadia infekce EB virem v sérech pacientů. Oproti stávajícím bioanalytickým metodám SPR biosenzor přímo detekuje koncentraci několika biomarkerů bez použití dalších reakčních kroků.

Badatelé z *Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR* hledali spolu s experimentátory na Curyšské univerzitě odpověď na otázku, jak se ve vodě rozpouští elektron. Bude se tato záporně nabitá elementární částice rozpouštět podobně jako třeba chloridový anion z kuchyňské soli v polévce, nebo se uplatní kvantově mechanické efekty a rozpouštění proběhne podle zcela jiného scénáře? Tyto otázky nejen narážejí na hranici mezi světem klasické a kvantové mechaniky, ale mají i praktický význam v radiační chemii. Vznik a rozpouštění elektronů ve vodě a jejich následné reakce jsou významné jak pro pochopení mechanismů radiační terapie nádorů, tak pro chemické procesy probíhající v meziskladech s jaderným odpadem. Výpočty provedené v Praze spolu s ultrarychlými laserovými experimenty v oblasti terahertzového záření realizovanými v Curychu dávají odpověď na základní otázky týkající se vzniku hydratovaného elektronu. Ukazuje se, že elektron vzniká ve vodě fotoionizací jako delokalizovaná kvantová vlna, která však během jedné pikosekundy kontrahuje na zhruba sférický objekt s poloměrem 0,25 nanometru. *Janne Savolainen, Frank Uhlig, Saima Ahmed, Peter Hamm & Pavel Jungwirth: Direct observation of the collapse of the delocalized excess electron in water. Nature Chemistry 608/2014; 6. 697-701(2014).*

<http://www.nature.com/nchem/journal/v6/n8/abs/nchem.1995.html#affil-auth>

Biologické a lékařské vědy

Bádání se orientují primárně na procesy probíhající v živých systémech – od úrovně molekul přes úroveň buněk až k celým organismům.

- Biofyzikální ústav AV ČR <http://www.ibp.cz/cs/>
- Biotechnologický ústav AV ČR <http://www.ibt.cas.cz/>
- Fyziologický ústav AV ČR <http://www.fgu.cas.cz/>
- Mikrobiologický ústav AV ČR <http://mbu.cas.cz/>
- Ústav experimentální botaniky AV ČR <http://www.ueb.cas.cz/cs>
- Ústav experimentální medicíny AV ČR <http://uem.avcr.cz/institute/>
- Ústav molekulární genetiky AV ČR <http://www.img.cas.cz/>
- Ústav živočišné fyziologie a genetiky AV ČR <http://www.iapg.cas.cz/>

V oblasti biofyziky probíhá základní výzkum struktury, evoluce, funkce a dynamiky biologických systémů, tedy biomolekul, buněčných součástí, celých buněk i buněčných populací. Předmětem výzkumů je například vztah DNA – protein (bílkovina) nebo vliv faktorů životního prostředí na organismy.

Výsledky biomedicínského výzkumu mají sloužit k vývoji nových diagnostických i léčebných postupů v medicíně. Teoretický základ pro ně představují objevy v oblastech normální i patologické fyziologie, týkající se mechanismů vzniku závažných onemocnění člověka, jako jsou např. cévní a mozkové příhody, ischemická choroba srdeční, diabetes, dědičné metabolické poruchy a neurodegenerativní onemocnění. Neurofyziologové studují problémy sahající od mechanismů uvolňování neuropřenašečů k jejich membránovým receptorům až po regulaci tělesných funkcí na úrovni celého organismu. V molekulární a buněčné fyziologii se zkoumá například problematika buněčného metabolismu, přenosu signálu a transportu látek s vysokým obsahem energie.

Nejen v medicíně, ale také ve farmaceutickém či kvasném průmyslu nacházejí široké využití poznatky mikrobiologů vztahující se k fyziologii, biochemii a genetice mikroorganismů, včetně jejich vlivu na rostlinné a živočišné hostitele, stanovuje se struktura biologicky účinných látek, které mikroorganismy produkují, studují se i jejich biodegradční aktivity. Konvenční i bezmikrobní modely slouží k výzkumu imunitních mechanismů, k poznávání příčin a možné terapie nádorových a autoimunitních onemocnění.

Stejně tak se badatelé věnují mechanismům onemocnění centrální nervové soustavy, poranění mozku a míchy, zabývají se získáváním, značením a užitím kmenových buněk k léčbě poranění mozku či míchy a neurodegenerativních onemocnění, dále molekulární embryologii a tkáňovými náhradami.

Botanikové řeší mimo jiné opravu poškozené DNA v rostlinách či strukturu velkých rostlinných genomů, studují hormonální a ekologickou kontrolu růstu a vývoje rostlin, mechanismy účinku růstových regulátorů rostlin, fyziologické aspekty působení rostlinných virů. Orientují se i na biotechnologie.

V živočišné fyziologii a genetice je předmětem výzkumů vývojová biologie a embryologie živočichů, evoluční genetika savců, ale i molekulární ekologie – a samozřejmě biomedicínský výzkum.

Se společnou studií *Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR a Biofyzikálního ústavu AV ČR* týkající se původu života na Zemi, konkrétně mechanismu vzniku nukleových bází z molekul formamidu, kdy zdrojem energie pro jejich syntézu byly impakty asteroidů, souvisí i další práce *Biofyzikálního ústavu AV ČR*: tamní vědci vypracovali spolu se zahraničními experimentálními laboratořemi teoretický model, jak se mohly ony nukleové báze (základní chemické konstituenty – stavební kameny – molekuly ribonukleové kyseliny RNA považované za primární biologickou molekulu) v nejranějších fázích evoluce samy, bez přítomnosti enzymů, spojovat ve formě nukleotidů do krátkých řetězců a jak si tyto krátké řetězce následně vyvinuly katalytické funkce nezbytné pro vytváření stále delších úseků RNA a nakonec složitých biomolekul. Jedná se o dosud chemicky nejuplněnější způsob samovolné polymerizace RNA, který by byl možný v prebiotických podmínkách a bez účasti jakýchkoli dalších pomocných molekul.

Judit E. Šponer, Jiří Šponer, Alessandra Giorgi, Ernesto Di Mauro, Samanta Pino, and Giovanna Costanzo: Untemplated Nonenzymatic Polymerization of 3',5'-cGMP: A Plausible Route to 3',5'-Linked Oligonucleotides in Primordia. J. Phys. Chem. B, 2015, 119 (7), pp 2979–2989.

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.5b00601>

V **Biofyzikálním ústavu AV ČR** v rámci projektu Centra excelence GAČR **Evoluce a funkce komplexních genomů rostlin** (P501/12/G090, koordinátor prof. RNDr. Boris Vyskot, Dr.Sc.), na němž se podílejí také **Ústav experimentální botaniky AV ČR, Biologické centrum AV ČR** a Masarykova univerzita-CEITEC, studují problematiku struktury a dynamiky genomu, zejména otázky polyploidie a hybridizace. Získané poznatky umožní detailněji pochopit biodiverzitu a evoluci druhů, genetické složení a funkci specifických rostlinných chromozomů (pohlavní chromozomy a B chromozomy) i epigenetické procesy, které vytvářejí rostlinný fenotyp. Analýzou jaderných genomů rodu *Linaria* (lnice) a *Nicotiana* (tabák) již byly identifikovány bakteriální geny z *Agrobacterium rhizogenes* (bakterie poškozující jabloně), které se do rostlin dostaly unikátním horizontálním přenosem. Fylogenetickou analýzou bylo zjištěno, že některé kopie těchto genů jsou zřejmě dosud funkční a podrobují se jiným selekčním tlakům než v případě degenerujících genů. Studie byla dále zaměřena na analýzu funkce genů, které odpovídají za zvýšenou toleranci rostlin *Silene vulgaris* (Silenka nadmutá) vůči těžkým kovům. Podařilo se identifikovat tři kandidátní geny (APx, POD a COPT5), které mají výrazně odlišnou expresi v tolerantních