

6 / 2025
SVAZEK 75

ČESKOSLOVENSKÝ ČASOPIS **PRO FYZIKU**®



- KATEDRA CHEMICKÉ FYZIKY A OPTIKY 60 • ULTRARYCHLÁ SPINTRONIKA •
- ATOMOVÁ SPEKTROSKOPIE A ZÁKLADNÍ FYZIKA • ROZHOVOR S E. HULICIUSEM
- KVANTOVÁ DYNAMIKA MALÝCH MOLEKUL • VRATNÁ SÍLA • $75 + 75 = 150$



ČESKOSLOVENSKÝ ČASOPIS PRO FYZIKU 6/2025

Založen roku 1872 jako
„Časopis pro pěstování matematiky a fysiky“

Vydává Fyzikální ústav Akademie věd
České republiky, v. v. i.

Vychází 6 čísel ročně,
uzávěrka tohoto čísla: prosinec 2025

Founded in 1872 as „Časopis pro pěstování
matematiky a fysiky“ – “The Journal for
Cultivation of Mathematics and Physics”
Published bimonthly in Czech and Slovak
by Institute of Physics,
of the Czech Academy of Sciences

Vedoucí redaktor – Editor-in-Chief:
Jan Valenta

Výkonná redaktorka:
Jana Žďárská

Redakční kruh – Editorial Board:
Jaroslav Bielčík, Ivo Čáp, Stanislav Daniš,
Miroslav Dočkal, Ivan Gregora, Libor
Juha, Petr Kácovský, Eva Klimešová,
Ivana Kolmašová, Jan Kříž, Martin
Ledinský, Jana Musilová, Karel Výborný †,
Ivan Zahradník, Peter Zamarovský

Sekretariát redakce:
Ondra M. Šípek
Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i.
Na Slovance 2, 182 00 Praha 8
tel.: +420 266 052 152
e-mail: cscasfyz@fzu.cz

Propagace, inzertní oddělení:
Jana Žďárská
e-mail: zdarskaj@fzu.cz

Jazyková úprava:
Stanislava Burešová, Naďa Mrkvýková

Výroba, grafika, tech. redaktor:
© Jiří Kolář

Tisk: Grafotechna plus, s. r. o.
Cena jednoho výtisku je 95 Kč.
Objednávky a prodej jednotlivých čísel
v ČR vyřizuje redakce.

Na Slovensku časopis rozšiřuje
Jednota slovenských matematikov a fyzikov,
pobočka v Žiline, Ul. 1. mája 32, 010 01 Žilina,
e-mail: ivo.cap@fel.uniza.sk

Distribution rights in foreign countries:
Kubon & Sagner, PO Box 240108,
D-8000 München 34

Časopis je zařazen na Seznam recenzovaných
neimpaktovaných periodik vydávaných v ČR.

Registrace: MK ČR E 3103, ISSN 0009-0700
(Print), ISSN 1804-8536 (Online).
Copyright © 2025 Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i.

Web: <https://ccf.fzu.cz>
Facebook: @ccf.fzu.cz
Twitter: @proFyziku



Úvodník

Cesta do hlubin duše vědce

Přesně takový název nesla netradiční přednáška¹ Vojtěcha Svobody z FJFI, která proběhla v květnu letošního roku na katedře fyziky FEL ČVUT v rámci přednáškového cyklu *Fyzikální čtvrtky*. Tento referát s pořadovým číslem 662 určitým způsobem jemně vybočoval z řady tradičních přednášek běžně zde probíhajících. Jednalo se totiž o osobní retrospektivní zamyšlení vědce nad vlastnostmi nesporně uchopitelnými či popsatelnými, přesto však zásadně formujícími vědecké myšlení a přístup k poznání.

„Setkáme se u Golema!“ Tak znělo pozvání Vojtěcha Svobody, ponoukající k návštěvě našeho tradičního diskusního místa v hospůdce Golem na Starém Městě pražském. Rozhovorů² a reportáží, které jsme společně připravili, je už víc, a tak jsem se těšila na další spolupráci. Když se Vojtěch rozhovořil o připravované přednášce *Duše vědce*, zprvu jsem tomuto tématu příliš nedůvěřovala. A to i přesto, že se o život vědců celoživotně zajímám a prostřednictvím životopisných rozhovorů pátrám i po dost neuchopitelných věcech, které formovaly jejich životní postoj a opracovávaly jejich rodící se vědeckou duši.

V úvodu mé první knihy rozhovorů s vědci³ jsem se zamýšlela nad tím, jak se vlastně takový vědec rodí. Jak se to stane, že se pro tuto složitou a náročnou dráhu rozhodne? V dětství jsem si myslela, že je to možná tak, že se někdo badatelem už narodil a byl k této práci vlastně předurčen. Proto je schopen pracovat tak usilovně a má až doslova nadpřirozené schopnosti – takové, jež ho po každém neúspěchu opět postaví na nohy a vrátí zpět do hry.

Život vědců bývá často popisován mottem *Per aspera ad astra*, tedy cestou trnitou ke hvězdám. A že těch trnů bývá někdy opravdu hodně! Avšak ti, kteří upsalí svůj život vědě, krácejí dál, nehledíce na neúspěchy a strádání, jež vědeckou práci často provázejí, a nenechají se odradit, i když ta pomyslná hvězda bývá někdy zatraceně daleko.

V roce 2017 jsme pro Československý časopis pro fyziku připravovali životopisný rozhovor právě o Vojtěchu Svobodovi, jímž rezonovala jedna zajímavá událost. Okamžik, kdy u mladého nerozhodného studenta nastal bod zlomu, životní vý-



hybka, kdy si jej věda zahákla drápkem a už nikdy nepustila zpět. Vojtěch tehdy putoval z Ostravy do Prahy obhlédnout FJFI v rámci dne otevřených dveří. Na pozvánce prý byl i symbol citrону vedle lisu jako asociace náročnosti studia, které člověka dokonale vymačká až na dřeň. A přesto – citron necitron – právě tehdy Vojtěch svou duši vědě upsal. „Pro mne je duše vědce v hrubé zkratce především odvaha udržet rovnováhu mezi protiklady: mezi hlavou, srdcem a intuicí, mezi krásou a pravdou, mezi prací a odpočinkem,“ vyznává se Vojtěch Svoboda. „Patří k ní i schopnost nechat nenásilně vyplavovat ‚bublinky‘ myšlenek, až se spojí v aha moment. A také vědomí, že věda není jen soutěžní aréna a ‚papírová hora‘, ale i hra, múza a umění. Duše vědce se ukazuje v tom, že i pod tlakem dokáže zůstat zvědavá, poctivá a otevřená – a že má odvahu přiznat omyl i riskovat směšnost. Možná právě tím zůstává živá.“

V současné době máme mnoho věcí i zážitků k dispozici online a vskutku velmi rychle, doslova na jedno kliknutí. Přemýšlím, jak se to snoubí s náročnou kariérou vědce. Vědecká dráha je i přes všechny dostupný pokrok stále velmi náročná, vědecký život bývá cestou přes překážky a často s nejistým výsledkem. A první může být jen jeden. Protože i vědec, který usilovně pracuje, nemusí vybádat nic anebo dojde ke kýženému výsledku o „chlup“ později než jeho kolega na druhém konci světa. A mezi vědeckou elitu se může dostat jen pár osobností. Ale kde jsou ti ostatní, o kterých se na titulních stránkách nepíše? Skryti v týmech, zejména – a přesto pilně pracující...

Přednáška badatele Vojtěcha Svobody má na YouTube v současné době zhruba 4000 zhlédnutí. Bude zajímavé sledovat, jak zapůsobila na posluchače a jaký bude mít i nadále ohlas. Vojtěch ji směřoval jako určitý motiv k úvahám mladé dychtivé generaci na prahu jejich počínající výzkumné kariéry. A někde tam mezi řádky číhá i ten pomyslný kyselý citron z pozvánky – symbol tlaku, který studium a vědecké práce přináší. Jenže právě v tom tlaku, někde v hloubce duše, se rozhoduje, zda se z toho úsilí zrodí diamant poznání, nebo se rozpadne v prach zapomnění.

Jana Žďárská

1 <https://www.youtube.com/watch?v=vtJ9JV-gf84>

2 V. Svoboda, J. Žďárská: Rozprava s Golemem. Čs. čas. fyz. 67, 312–318 (2017).

3 J. Žďárská: *Slasti a strasti vědců naší vlasti*. Academia, Praha 2022. ISBN 978-80-200-3324-6.

Obsah

60 LET KCHFO MFF UK

**Šedesát let Katedry chemické fyziky
a optiky na Matematicko-fyzikální
fakultě Univerzity Karlovy** 440

Jan Valenta a Petr Němec



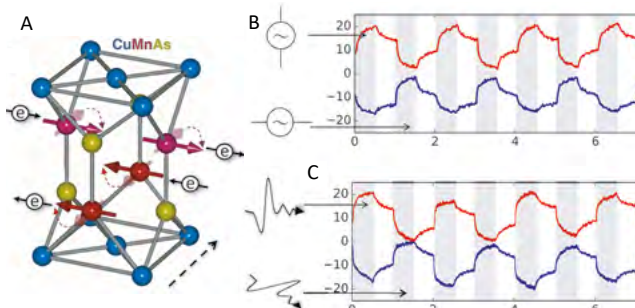
**Ultrarychlé procesy
v polovodičových materiálech
a jejich nanostrukturách** 442

Martin Kozák

60 LET KCHFO MFF UK

**Ultrarychlá spintronika s magnety,
co neдрží na lednici** 444

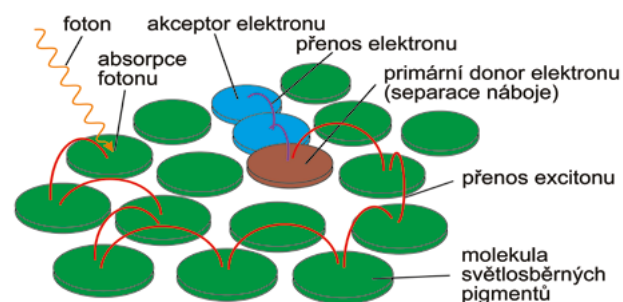
Lukáš Nádvorník, Eva Schmoranzarová,
Petr Němec



60 LET KCHFO MFF UK

**Primární procesy fotosyntézy jako
inspirace pro hledání nových
způsobů využití sluneční energie** 449

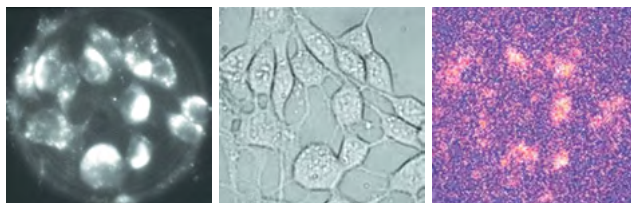
Karel Bouda, Tomáš Malina, Jakub Pšenčík



60 LET KCHFO MFF UK

**Luminiscenční detekce
singletního kyslíku** 452

Roman Dědic



**Atomová spektroskopie
a základní fyzika** 454

Jaroslav Zamastil a Vojtěch Patkóš

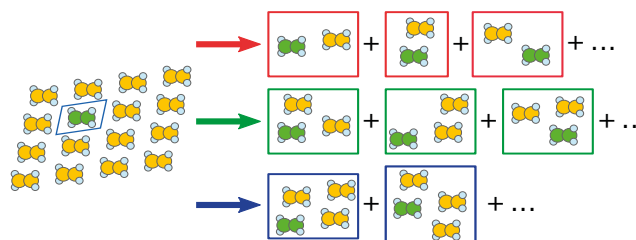
60 LET KCHFO MFF UK

Kvantová dynamika malých molekul 461

Lucie D. Augustovičová a Pavel Soldán

**Párové a nepárové interakce
v molekulárních systémech** 464

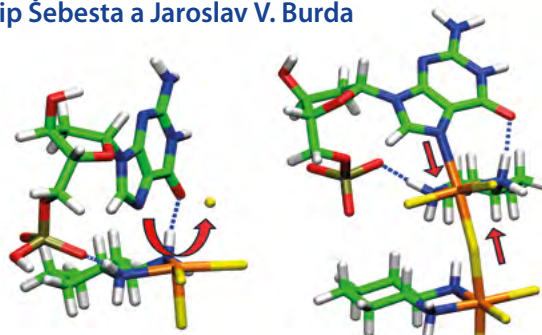
Jiří Klimeš a Pavel Soldán



60 LET KCHFO MFF UK

**Kvantověchemické projekty
protirakovinných léčiv
s biomolekulami** 468

Filip Šebesta a Jaroslav V. Burda

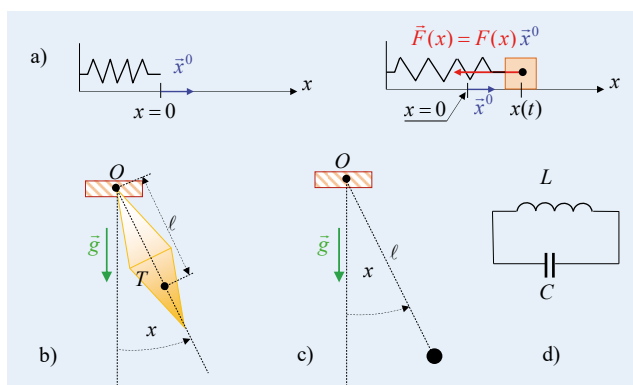


FYZIKÁLNÍ VZDĚLÁVÁNÍ

Vratná síla a periodický pohyb

476

Pavla Musilová



ZPRÁVY

Cumulonimbus, oblak známý i neznámý

484

Díl jedenáctý –
Amatérská meteorologická společnost
Tomáš Prouza, Jana Žďárská

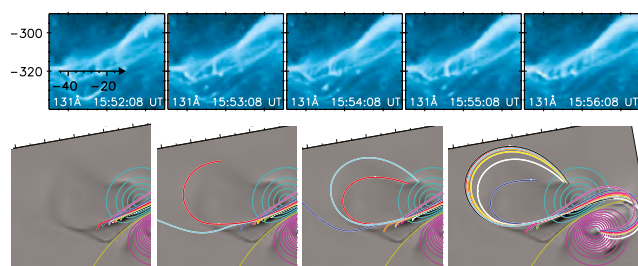


ZPRÁVY

Sluneční erupce jsou jako Fénix z popela

487

Výzkum klouzavé sluneční rekonexe
a důležitých procesů v koróně Slunce
Jana Žďárská



ZPRÁVY

Citlivější detekce biomolekul?

491

Klíčem je propojení nanokartáčů
a optických vláken

Jana Žďárská



V záři hvězd

495

Jana Žďárská

ROZHOVOR

Nalézání, objevování a realizace nového

Rozhovor s Eduardem Huliciusem
z Fyzikálního ústavu AV

497

Eduard Hulicius, Jana Žďárská



JINÉ

Obsah a autorský rejstřík

508

Čs. čas. fyz. svazek 75 (2025)



ŠEDESÁT LET KATEDRY CHEMICKÉ FYZIKY A OPTIKY NA MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ FAKULTĚ UNIVERZITY KARLOVY

Jan Valenta a Petr Němec

Katedra chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 3, Praha 2; petr.nemec@matfyz.cuni.cz

Následující blok článků představuje pestrou vědeckou činnost jedné z fyzikálních kateder na Matematicko-fyzikální fakultě (MFF) Univerzity Karlovy (UK). Útvar nesoucí dnes název *Katedra chemické fyziky a optiky* totiž slaví 60 let od svého vzniku a v tomto úvodním článku je stručně pojednáno o jeho historii i současnosti.

Katedra chemické fyziky a optiky byla založena k 1. září 1965. Hlavním důvodem pro její vznik bylo zajištění výuky fyziky na sousední *Fakultě přírodních věd*, která v současné době nese název *Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy* (PřF UK). Podnět k zapojení pracovníků MFF do výuky na PřF vyšel od akademika R. Brdičky a prof. J. Kouteckého, kteří si uvědomovali rostoucí potřebu fyzikálního vzdělání pro přírodovědce. Toto zaměření katedry se odrazilo i v jejím původním názvu, který zněl *Katedra fyziky pro přírodovědné obory* [1].

Vedle vedoucích katedry prof. Ladislava Zachoval (1906–1982) měla katedra jednoho docenta (K. Vacka), pět odborných asistentů a jednoho vědeckého pracov-

níka, tři techniky, pět laborantů, tři mechaniky, jednoho skláře a sekretářku — celkem 21 osob (z toho 8 akademických pracovníků). Rozsah vyučování zajišťovaný katedrou byl značný – týdně to bylo 65 hodin přednášek, 36 hodin cvičení, 24 hodin praktik, a navíc v dálkovém studiu 60 konzultačních hodin a 88 hodin soustředění za semestr. Tyto hodiny byly rozděleny mezi pět různých oborů PřF. Katedra nemohla celý objem výuky zvládnout vlastními silami, a proto některé úkazy pomáhali plnit externí pracovníci [2]. K tomu je třeba zmínit řadu výběrových přednášek pro vyšší ročníky fyzikálních oborů na MFF. Nepsanou povinností přednášejících bylo tehdy také sepsání učebních textů [3].

Na vědeckou práci tedy nezbývalo z počátku mnoho sil, ale přece jen byla už tehdy součástí života katedry. Směr bádání pochopitelně určil profesor Zachoval, který původně jako asistent prof. Závišky (UK) a prof. Nachtikala (ČVUT) pracoval v oboru ultrakustiky, ale za války byl zaměstnán ve fotografických závodech v Českém Brodě – tím se dostal k problematice vědecké fotografie a šířeji fotochemie a fotofyziky (obr. 1) [4]. V tomto oboru pak působil i jeho žák a následující vedoucí katedry Karel Vacek (1930–2022) a jeho spolupracovníci [3].

Dalším zásadním impulsem pro vývoj katedry byla stáž Dr. Jaroslava Pantoflíčka (1940–2021, obr. 2) ve skupině Dr. Karla Pátka na FZU ČSAV právě v době vzniku prvního československého laseru [5]. Díky tomu pak na katedře vznikaly další prototypy laserů (obr. 3), které byly využívány (mimo jiné) k prvním pracím na nelineárních optických efektech (Parma a Pelant [6]). V 80. letech zde byl postaven první pikosekundový laser v Československu (P. Malý, A. Svoboda a J. Večeř, 1982). Dnes je „ultrarychlá“ laserová spektroskopie možná nejúspěšnějším směrem výzkumu na katedře.

Vývoj badatelských témat se odrážel ve vzniku oddělení a jejich názvech.¹ Roku 1971 jsou založena dvě



Obr. 1 Fotografie laboratoře luminiscenční spektroskopie na KCHFO asi v první polovině 70. let 20. století. V popředí sedí dr. Fiala s tzv. bzuknou v ruce. Vysoký objekt vpravo vzadu je francouzský kryostat TBT a vedle vpravo menší skleněný kryostat. Za hlavou experimentátora je monochromátor SPM-2 (Carl Zeiss, Jena) a vlevo od něj je zapisovač (s vertikálně posuvným papírem) pro registraci signálu z fotonásobiče. Vlevo jsou shromážděny různé měřicí přístroje, zdroj vysokého napětí atd. Zdroj: sbírky KCHFO

1 Údaje jsou čerpány z každoročních vydání *Seznamu přednášek na MFF*, zvaných „oranžové Karolínky“ (k nahlédnutí např. v knihovně MFF UK).



Ultrarychlé procesy v polovodičových materiálech a jejich nanostrukturách

Martin Kozák

Katedra chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 3, Praha 2; m.kozak@matfyz.cuni.cz

Nejrychlejší procesy odehrávající se v látkách lze v dnešní době zkoumat s extrémním časovým i prostorovým rozlišením, umožněným kombinací femtosekundových laserů s elektronovými mikroskopy [1].

Oddělení kvantové optiky a optoelektroniky MFF (OOE – *optics and optoelectronics*) se dlouhodobě zabývá studiem ultrarychlých procesů, které se odehrávají v materiálech na časových škálách od femtosekund ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) po mikrosekundy. Zkoumání takto rychlých jevů je možné jedině za použití velice krátkých záblesků koherentního světla z laseru – tzv. laserových pulzů. Jejich délka může klesnout do oblasti jednotek až stovek femtosekund.

Základní schéma experimentu lze připodobnit k fotografii s bleskem. Pokud bychom se pokoušeli zaznamenat rychlý děj pomocí fotoaparátu s mechanickou závěrkou, jejíž doba otevíření je delší než doba trvání pozorovaného děje, získáme rozmazaný obraz události a nejsme schopni rozlišit jednotlivé části procesu. Pokud ovšem tmavou scénu osvětlíme krátkým zábleskem světla s dobou trvání kratší, než je doba trvání pozorovaného jevu, můžeme získat ostrý snímek scény v okamžiku jejího osvětlení světlem. Pokud je proces opakovatelný (odraz míče od podložky), můžeme událost znovu odstartovat (odhození míče), posunout čas, kdy scénu osvětlíme zábleskem světla, a získat snímek posunutý v čase. Takto lze celý proces nasnímat s časovým rozlišením, jež je omezené pouze délkou světelného záblesku, který používáme k osvětlení.

Časově rozlišená laserová spektroskopie využívá tohoto principu, ovšem fotoaparát je nahrazen citlivým detektorem optického záření a záblesk výbojky

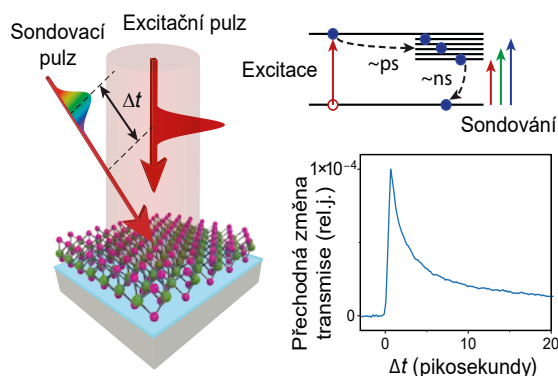
je nahrazen ultrakrátkým laserovým pulzem s délkou několika jednotek až stovek femtosekund. K odstartování procesu se využívá druhý excitační pulz, který je od prvního oddělen pomocí polopropustného zrcátka. Pokud studovaný materiál absorbuje fotony excitačního pulzu, dochází vlivem absorpce k excitaci elektronů ze základního stavu na vyšší energetické hladiny. Jelikož má systém tendenci navrátit se do energeticky nejvýhodnějšího základního stavu s nejnižší energií, elektrony pomocí vzájemných interakcí, interakcí s kmity atomů krystalové mřížky či s poruchami krystalu (povrch, příměsi, vakance atd.) energii ztrácejí a vrací se zpět na základní hladinu. Pomocí měření změn propustnosti světla, odrazivosti či jiné optické vlastnosti studovaného vzorku jako funkce časového zpoždění obou pulzů lze zrekonstruovat dynamiku procesu, který je předmětem měření (viz obr. 1).

Na takto krátkých časových škálách se odehrávají jevy spojené s optickou excitací elektronů v látkách (jednotky fs), jejich relaxací (fs-ps), rekombinací a transportem (ps-μs). Dále je možné pozorovat koherentní oscilace atomů v krystalové mřížce, tzv. koherentní fonony, které mají typické periody desítek fs až jednotek ps [2]. V posledních několika letech se také věnujeme zkoumání attosekundových procesů spojených s excitací elektronů pomocí silného elektrického pole nerezonantních pulzů a vysoce nelineární odezvou materiálu pomocí tzv. spektroskopie vysokých harmonických frekvencí [3]. Příkladem nových směrů výzkumu, kterým se věnujeme, je také kontrola tzv. údolní polarizace elektronů v pevných látkách. Ukázali jsme, že tento kvantový stupeň volnosti, který představuje vlnový vektor elektronu v krystalu, je možné kontrolovat a měřit s časovým rozlišením několika desítek femtosekund [4].

V současné době tento výzkum probíhá ve dvou laboratořích, kde je nainstalováno celkem pět femtosekundových laserových systémů s různými parametry – od systému poskytujícího nejkratší pulzy s délkou 6 fs až po systémy generující pulzy se špičkovým výkonem desítek GW.

Obr. 1

Zkoumaný vzorek je vyveden z rovnovážného stavu díky absorpci fotonů excitačního pulzu. Změny optických vlastností vyvolané elektronickými excitacemi jsou charakterizovány pomocí sondovacího pulzu jako funkce vzájemného časového zpoždění mezi pulzy (obr. vpravo dole ukazuje typické doznívání měřené změny propustnosti).



Ultrarychlá spintronika s magnety, co neдрží na lednici

Lukáš Nádvorník, Eva Schmoranzarová, Petr Němec

Katedra chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 3, Praha 2; lukas.nadvornik@matfyz.cuni.cz

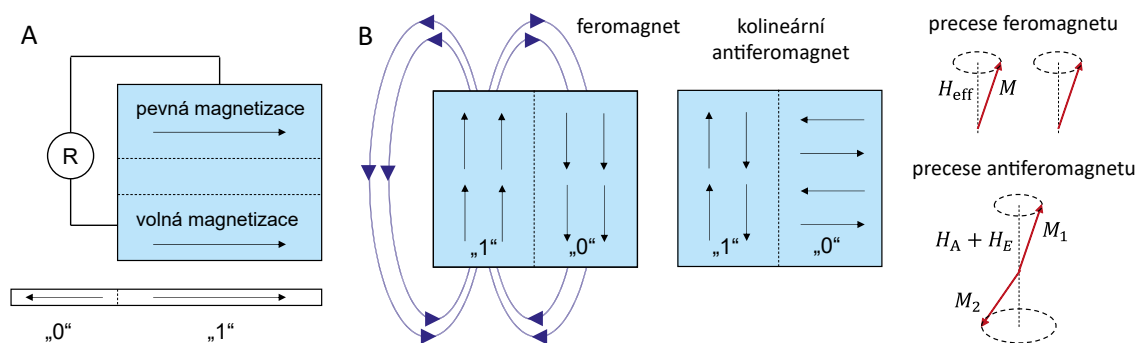
Kompenzované magnety jsou magnetické látky, v nichž jsou magnetické momenty atomů uspořádány tak, že se vzájemně kompenzují. Obdobně jako do konvenčních magnetů do nich lze zapisovat, ukládat a zpětně z nich vyčítat informaci, ale s teoreticky výrazně větší kapacitou a s o řády vyšší frekvencí. Snaha o ovládnutí takových ultrarychlých dynamik magnetického uspořádání je základním posláním optických, časově rozlišených experimentů, prováděných na těchto materiálech v Laboratoři optospintroniky.

Éra zettabytů a petawatt hodin

Od druhé poloviny 20. století zažívá informační technologie (IT) bezprecedentní rozmach, který zásadně proměnil způsob, jakým komunikujeme, ukládáme a zpracováváme informace. Objem přenesených i uložených dat dnes dosahuje zettabytových měřítek: podle analytické studie IDC společnosti Seagate bude v roce 2025 každoročně vytvořeno, zachyceno či zkopírováno přibližně 175 zettabytů ($1 \text{ ZB} = 10^{21} \text{ B} = 10^9 \text{ TB}$) digitálních dat, zatímco na přelomu milénia to bylo jen 60 petabytů ($1 \text{ PB} = 10^{15} \text{ B}$) a koncem osmdesátých let 2 terabyty, tedy obsah dnešního menšího pevného disku [1, 2]. Tento exponenciální růst však provází také stále větší energetické nároky. Jen samotná datová centra již nyní spotřebovávají více než 1–2 % celosvětově vyprodukované elektriny a jejich podíl dále roste prudkým tempem okolo 20 % ročně [3]. Odhady naznačují, že do roku 2030 může celý IT sektor zodpovídat až za 20 % globální spotřeby elektrické energie, tedy přibližně 9 petawatt hodin ročně [2] – což odpovídá zhruba dvou tisícinásobku roční výroby jaderné elektrárny Temelín.

Udržet další rozvoj v této „zettabytové éře“ proto vyžaduje hledání nových, vysoce účinných konceptů zpracování a ukládání informace. Jednou z perspektivních cest je spintronika, obor elektroniky a základního výzkumu, který využívá nejen náboj, ale i spin elektronu, a nabízí potenciál pro zásadní snížení energetické náročnosti výpočetních a paměťových technologií [4].

Spintronika založená na feromagnetických záznamových materiálech (látkách s magneticky uspořádanými momenty a nenulovým celkovým momentem) skutečně dokázala několikrát v historii vývoj IT a záznamových technologií revolucionizovat. Příkladem může být objev a aplikace gigantické a tunelovací magnetorezistence k efektivnímu vyčítání dat uložených na feromagnetických discích, která v prvním desetiletí tohoto století umožnila přechod k terabytovým pevným diskům (princip vysvětlen na obr. 1A) [5]. Další významnou spintronicou součástí může být nedávno vyvinutá magnetická RAM paměť, která nabízí rychlé a energeticky úsporné ukládání dat do bitů podobajících se GMR senzoru. Tento koncept nalézá uplat-



Obr. 1 Feromagnety vs. antiferomagnety. Panel A: Ukázka využití gigantické magnetorezistence (GMR) ve čtecí hlavě pevných disků. Informace v podobě „0“ a „1“ je zapsána do feromagnetických domén na disku, nad nímž se ve vzdálenosti 5–15 nm pohybuje GMR senzor. Ten se skládá z feromagnetické vrstvy s pevně orientovanou magnetizací (nahore), spaceru a další feromagnetické vrstvy (dole), jejíž magnetizace se vlivem magnetické interakce orientuje podle domény na disku pod ním. Elektrický odpor celé *sandwich* se mění až o 100 % podle vzájemné orientace magnetizací obou vrstev. Panel B vlevo: Příklad zápisu logické „1“ a „0“ do feromagnetu a kolineárního antiferomagnetu. Křivky naznačují vnější magnetické pole feromagnetického bitu, jenž může paraziticky interagovat s vedlejším bitem a limitovat velikost domén a hustotu zápisu. Ukládání dat do antiferomagnetu těmito jevy netrpí. Panel B vpravo: Ukázka koherentní precese feromagnetických a antiferomagnetických momentů okolo efektivního magnetického pole. V případě feromagnetů zůstávají momenty paralelní, zatímco u antiferomagnetů jsou spiny obou podmříží vůči sobě skloněny, což do procesu zahrnuje také intenzivní výměnnou interakci a vede k řádově vyšším precesním frekvencím.



PRIMÁRNÍ PROCESY FOTOSYNTÉZY JAKO INSPIRACE PRO HLEDÁNÍ NOVÝCH ZPŮSOBŮ VYUŽITÍ SLUNEČNÍ ENERGIE

Karel Bouda, Tomáš Malina, Jakub Pšenčík

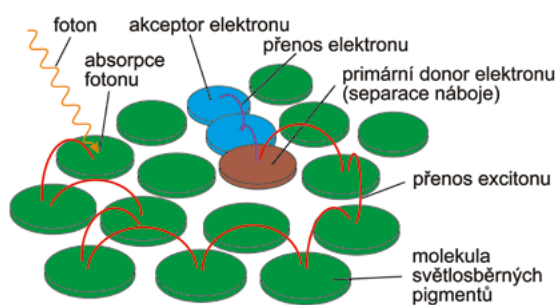
Katedra chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Praha

Rostoucí poptávka po obnovitelných zdrojích energie přivádí stále větší pozornost ke studiu fotosyntézy. Obsahem tohoto příspěvku je stručný přehled historie a současného stavu výzkumu primárních procesů fotosyntézy na katedře chemické fyziky a optiky, který je doplněn o úvod do problematiky.

Fotosyntéza je hlavním zdrojem energie pro drtivou většinu organismů na Zemi, včetně člověka, a také dominantním zdrojem kyslíku v zemské atmosféře [1]. V průběhu evoluce dosáhly fotosyntetické organismy schopnosti získávat elektrony z vody a štěpit ji tak na kyslík a protony. Tím nastartovaly dramatické změny v zemské atmosféře, které umožnily vývoj organismů využívajících kyslík k buněčné respiraci. Energie získaná ze slunce dávnými fotosyntetickými organismy a uložená ve formě fosilních paliv ještě stále představuje hlavní zdroj energie pro pokrytí potřeb lidstva.

Z hlediska fyziky je nejzajímavější počáteční fáze fotosyntézy, tzv. *primární procesy* fotosyntézy [2]. Ty začínají absorpcí fotonu pigmentem, např. chlorofylem nebo karotenoidem, nejčastěji v tzv. světlosběrných anténách. To jsou většinou pigment-proteinové komplexy, které svou plochou zvětšují účinný průřez absorpce. Pigmenty v anténách jsou navíc organizovány tak, aby umožnily rychlý přenos excitační energie do tzv. reakčních center, kde je tato energie využita k separaci elektronu (obr. 1). Elektron je poté rychle odveden sérií elektronových přenašečů tak, aby nemohlo dojít k zpětné rekombinaci. Tím je završena první fáze konverze sluneční energie do energie chemické, která je následně využita v dalších, již spíše biochemických procesech.

Primární procesy fotosyntézy probíhají s vysokou kvantovou účinností, která se blíží 100 % [1]. I z tohoto důvodu slouží fotosyntetické komplexy jako inspirace pro vývoj nových způsobů využití sluneční energie. Mezi ně patří např. umělá fotosyntéza, která bude využívat sluneční energii k rozštěpení vody na kyslík a vodík. Vodík pak bude využit jako palivo, jehož spalováním bude opět vznikat voda. Další možností jsou různá biohybridní zařízení využívající sluneční energii k redukci oxidu uhličitého například na metanol, který také může sloužit jako palivo. To by bylo užitečné i z hlediska snižování koncentrace oxidu uhličitého v atmosféře, jehož nadbytek způsobuje klimatickou změnu. Znalosti získané během studia fotosyntézy také lze využít při vývoji nových typů solárních článků.



Obr. 1 Schéma primárních procesů fotosyntézy. Ve světlosběrných anténách dochází k absorpci fotonů. Díky převážně coulombickým interakcím mezi pigmenty dochází po absorpci k přenosu excitační energie do reakčního centra. V něm je excitační energie využita k separaci elektronu, který je poté odveden z reakčního centra elektronovým transportním řetězcem.

Primární procesy fotosyntézy se dostaly do centra zájmu na katedře chemické fyziky a optiky (KCHFO) poměrně krátce po jejím založení. Prof. Karel Vacek [3], který byl jejím vedoucím od roku 1972, ze studia fotosyntézy postupně učinil jednu z priorit vědeckého zaměření katedry, která nahradila předchozí zaměření na halogenidy stříbra. Fotosyntézou se v jeho týmu zabýval např. prof. Jan Nauš, pozdější dlouholetý vedoucí katedry biofyziky na Univerzitě Palackého v Olomouci, a zejména pak prof. Jan Hála [4]. Ten zavedl na katedře v té době moderní metody nízkoteplotní spektroskopie vysokého spektrálního rozlišení, které aplikoval mimo jiné právě na fotosyntetické pigmenty a systémy. Mezi tyto metody patří např. site-selektivní spektroskopie, Špolského spektroskopie a metoda spektrálního vypalování děr [5]. V dobách, kdy technická úroveň instrumentace neumožňovala metodami optické spektroskopie studovat jednotlivé komplexy nebo molekuly, představovaly zmíněné metody jediný způsob, jak získat informace o tvaru a šířce homogenní čáry molekul. Z šířky spektrálních děr pak bylo možné na základě relací neurčitosti mezi energií a časem určit dobu života excitovaného stavu, případně i rychlostní konstanty přenosu excitační energie.



Luminiscenční detekce singletního kyslíku

Roman Dedic

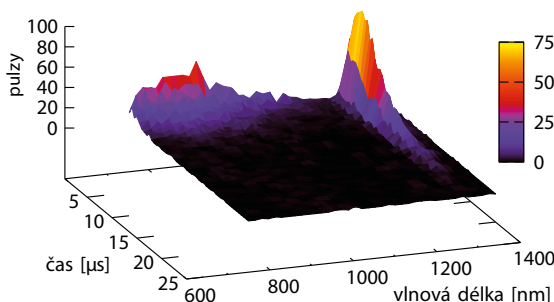
Katedra chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 3, Praha 2; roman.dedic@matfyz.cuni.cz

Kyslík ve svém vzbuzeném singletním stavu je významným hráčem v řadě procesů v přírodě i v průmyslu. Časově rozlišená detekce jeho slabé fosforescence v blízké infračervené oblasti je významnou možností pro studium jeho vzniku, interakcí s okolím a pochopení jeho rolí. V některých případech může být s výhodou využita zpožděná fluorescence místo přímé detekce.

Singletní kyslík

Molekula kyslíku O_2 je jednou z nejdůležitějších látek pro život na Zemi. V roce 1848 Michael Faraday objevil, že mýdlové bubliny plněné kyslíkem jsou vtahovány do magnetického pole na rozdíl od bublin plněných jinými plyny. Paramagnetismus kyslíku vysvětlil v roce 1925 Robert S. Mulliken jako důsledek přítomnosti dvou nespárovaných elektronů v základním stavu $^1\Sigma_g^-$, díky čemuž má celkový spin 1, a je tedy tripletní. Mulliken též předpověděl, že nad tímto stavem leží dva excitované singletní stavy $^1\Sigma_g^+$ a $^1\Delta_g$. Singletní kyslík ve stavu $^1\Delta_g$ (často označovaný jako 1O_2) byl pak experimentálně pozorován Hansem Kautským v roce 1939. Vyšší singletní excitovaný stav rychle relaxuje do nižšího. Návrat nižšího singletního stavu kyslíku do stavu základního je jedním z nejvíce zakázaných fosforescenčních přechodů v přírodě. Izolovaná molekula má dobu života excitovaného stavu v desítkách minut. Ve vodném prostředí nebo v biologických systémech se pak vlivem zhášení během srážek a reakcí s okolními molekulami zkracuje na jednotky mikrosekund. Vlnová délka emise leží v blízké infračervené oblasti kolem 1270 nm v závislosti na prostředí.

Molekula kyslíku ve svém základním tripletním stavu je vlivem spinového zákazu (Wignerovo–Witmerovo pravidlo) relativně málo reaktivní. Po přechodu do vzbuzeného singletního stavu její reaktivita o několik řádů vzrůstá, neboť pro singletní molekulu již spinový zákaz neplatí a má energii navíc.



Obr. 1 Průběh jednoexponenciálního poklesu fosforescence fotosenzibilizátoru TPPS₄ ve vodě (kolem 900 nm) a nárůstu a poklesu fosforescence jím generovaného singletního kyslíku (kolem 1270 nm) v časově a spektrálně rozlišených datech.

Kyslík v singletním stavu může vznikat během výboje v plynu, chemickými reakcemi nebo přenosem energie z tripletního excitovaného stavu jiné molekuly, tzv. fotosenzibilizátoru [1].

Vysoká reaktivita singletního kyslíku má řadu negativních rolí: singletní kyslík se podílí na poškození dýchacích buněk, stárnutí kůže, oxidativním poškození dýchacího a fotosyntetického aparátu, je zodpovědný za blednutí barev a degradaci potravin a nápojů. Na druhou stranu má i řadu kladných rolí: funguje v těle jako signální molekula, podílí se na imunitní odpovědi bílých krvinek, může být využíván ve fotodynamické terapii řady chronických i onkologických onemocnění [2], při syntézách čistých sloučenin nebo při čištění odpadních vod [3].

Detekce luminiscence singletního kyslíku

Tradice spektroskopického výzkumu primárních procesů fotosyntézy na KCHFO je dlouhá. Vzhledem k významné negativní roli singletního kyslíku ve fotosyntetických systémech byla na přelomu století vybudována světově unikátní aparatura využívající citlivý infračervený fotonásobič k detekci luminiscence singletního kyslíku i tripletních stavů jeho fotosenzibilizátorů se spektrálním a časovým rozlišením. Takto získaná data poskytují cenné informace o tom, jak tripletní stavy fotosenzibilizátorů přenášejí energii na singletní stav kyslíku a jak tento singletní stav interaguje se svým okolím. Obrázek 1 ukazuje typická emisní data: v levé části můžeme vidět exponenciální pokles signálu fosforescence fotosenzibilizátoru. Rychlost poklesu charakterizuje rychlost přenosu energie na kyslík. Poklesu signálu fotosenzibilizátoru odpovídá v pravé části postupný exponenciální nárůst signálu singletního kyslíku, který je přenosem energie z tohoto tripletního stavu fotosenzibilizátoru výměnným mechanismem populován. Pokles signálu samotného singletního kyslíku pak nese informaci o jeho interakci s okolím. Měření takových kinetik poskytuje celkový obrázek o procesech vzniku a reakcích singletního kyslíku.

V oblasti výzkumu primárních procesů fotosyntézy byla aparatura využita např. k hodnocení vlivu různých těžkých kovů, které nahrazují hořčík v molekulách chlo-



Atomová spektroskopie a základní fyzika

Jaroslav Zamastil a Vojtěch Patkός

Katedra chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2;
jaroslav.zamastil@matfyz.cuni.cz, vojtech.patkos@matfyz.cuni.cz

V tomto článku je zdůrazněn význam přesných spektroskopických měření a výpočtů a jejich souvislost se základní fyzikou. Na příběhu určení poloměru protonu je ilustrováno, k jakým objevům a překvapením může v této oblasti výzkumu docházet.

1. Základní fyzika

Od roku 1973 máme teorie elektromagnetických (EM), slabých a silných jaderných interakcí, které se, poněkud nešťastně, souhrnně označují jako standardní model (SM). Tyto teorie jsou tzv. kvantové teorie pole, to znamená, že elementární částice, jako elektrony, neutrino, kvarky atd., jsou chápány jako excitace příslušných kvantových polí. Interakcí těchto polí částice vznikají a zanikají. Například v případě beta rozpadu se d-kvark rozpadá na u-kvark, elektron a elektronové antineutrino. Vznik a zánik částic nemusí být reálný jako v případě beta rozpadu, ale pouze virtuální. Například elektron v atomu může vyzářit a zase pohltit foton. Síla interakce je charakterizována bezrozměrnou vazbovou konstantou. V případě elektromagnetických interakcí se tato bezrozměrná vazbová konstanta nazývá konstanta jemné struktury α a její hodnota je zhruba $1/137$. Pokud je hodnota vazbové konstanty malá jako v případě konstanty jemné struktury α , je možno interakci mezi kvantovými poli započítat tzv. *poruchovou metodou*, to znamená, že se měřitelná veličina vyjádří jako řada v mocninách vazbové konstanty. Například pro frekvence, na nichž atomy pohlcují a vyzařují EM záření, dává kvantová elektrodynamika výsledek

$$\nu_{mn} = Rc(f_n - f_m + L_n - L_m) \quad (1)$$

kde R je tzv. *Rydbergova konstanta*, c je rychlost světla ve vakuu a f_n je funkce daná řešením Diracovy rovnice. Tuto funkci je možno obecně napsat jako řadu v mocninách $(Z\alpha)^2$, kde Z je náboj jádra,

$$f_n = f_n^{(0)} + (Z\alpha)^2 f_n^{(2)} + \dots, \quad (2)$$

kde $f_n^{(0)}$ je dané řešením Schrödingerovy rovnice, v níž je operátor energie vyjádřen jako součet kinetických energií elektronů a jádra a elektrostatické potenciální energie mezi elektrony navzájem a mezi elektrony a jádrem, která ubývá se vzdáleností mezi částicemi (tzv. *Coulombův zákon*). Koeficient $f_n^{(2)}$ se získá započtením nejdůležitějších relativistických a magnetických efektů, jako je spin-orbitální a spin-spinová interakce. Pokud chceme, můžeme funkci f_n vyjádřit přesně, bez rozvoje

v $(Z\alpha)^2$. Funkce L_n v rovnici (1) je tzv. *Lambův posun*. Tuto funkci nejsme schopni spočítat přesně; jsme však schopni ji vyjádřit v mocninách α :

$$L_n = \alpha^3 L_n^{(3)} + \alpha^4 L_n^{(4)} + \dots \quad (3)$$

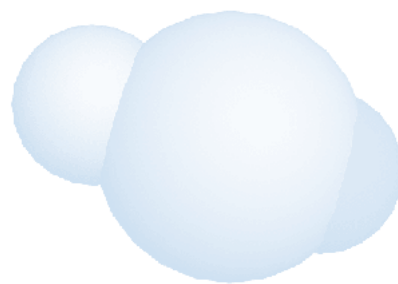
Lambův posun je určen výše zmíněnými efekty kvantové elektrodynamiky – vyzářením a pohlcením virtuálního fotonu, vznikem a zánikem elektron-pozitronového páru a zpožděnou částí elektromagnetické interakce.

Standardní model je v soulahu s experimentálními daty všude tam, kde jsme schopni provést dostatečně přesná měření a doprovodit je dostatečně přesnými výpočty. Dostatečně přesné výpočty jsme schopni provést pouze v případě, kdy je absolutní hodnota bezrozměrné vazbové konstanty mnohem menší než jedna, protože pak můžeme použít poruchovou metodu popsanou výše. Zatímco v případě elektromagnetických a slabých jaderných interakcí to je splněno, v případě silných jaderných interakcí tomu tak není. Silné interakce znamenají, že absolutní hodnota bezrozměrné vazbové konstanty není mnohem menší než jedna, ale naopak podstatně větší – již v padesátých letech minulého století si fyzici uvědomili, že např. bezrozměrná vazbová konstanta charakterizující sílu vazby mezi nukleony a pí mezony je zhruba 15. Postupem času si dále uvědomili, že díky výše zmíněnému efektu tvorby a zániku virtuálních částic se síla vazby mezi kvantovými poli mění v závislosti na přenesené hybnosti mezi částicemi. Ukázalo se, že se vzrůstajícím přenosem hybnosti síla vazby mezi kvarkovými poli klesá, a to sice díky vzájemné interakci gluonů, které zprostředkují sílu mezi kvarky. To znamená, že se ke všeobecnému překvapení ukázalo, že silné jaderné interakce se vzrůstajícím přenosem hybnosti slábnou. Při velkých přenosech hybnosti je tedy možno na ně použít výše zmíněnou poruchovou metodu.

Přes dosavadní souhlas teorií standardního modelu s experimenty jsme si zcela jisti, že teorie standardního modelu nejsou (nemohou být) zcela správné. Důvodem je již více než jednou zmíněný efekt tvorby a zániku virtuálních částic. Počítáme-li například výše uvedený



Kvantová dynamika malých molekul



Lucie D. Augustovičová a Pavel Soldán

Katedra chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 3, 12116 Praha 2;
lucie.augustovicova@matfyz.cuni.cz, pavel.soldan@matfyz.cuni.cz

Použití kvantové dynamiky k popisu procesů odehrávajících se jak ve vesmíru, tak v laboratoři je diskutováno. Pozornost je věnována zejména radiativní asociaci, což je fundamentální proces při tvorbě molekul v řídkých astrofyzikálních prostředích. Tento proces hrál zásadní roli v chemickém vývoji raného vesmíru a přispěl tak k významnému ochlazení plynů, jež vedlo ke vzniku prvních hvězdných objektů. Díky kombinaci teoretických výpočtů a nových experimentálních technik se dnes dostáváme k hlubšímu porozumění tomu, jak vesmír „vařil“ své první molekuly – a jak tento mechanismus ovlivňuje tvorbu molekul až do dnešních dnů.

Malé molekuly patří k základním stavebním kamenům našeho vesmíru. V porovnání s atomy vedou jejich vibrační a rotační pohyby k mnohem bohatší energetické struktuře, což poskytuje mnohé experimentální a teoretické výzvy. Z teoretického hlediska malé rozměry vyžadují použití metod kvantové fyziky k popisu těchto molekul. Vysocě přesné metody kvantové chemie, která se zabývá řešením Schrödingerovy rovnice pro elektrony, jsou využívány ke konstrukci křivek (pro dvojjadrové molekuly) a ploch (pro vícejadrové molekuly) potenciální energie, které mapují potenciální energii molekul v závislosti na polohách jader. Metody kvantové dynamiky jsou pak používány k řešení Schrödingerovy rovnice pro jádra, tj. ke studiu vibračních, rotačních a srážkových pohybů na těchto křivkách či plochách potenciální energie. Důležité přitom je, zda relevantní elektronové stavy molekuly jsou od sebe dostatečně energeticky odděleny či nikoliv. Pokud jsou, je možné řešit Schrödingerovu rovnici pro jádra v dobrém přiblížení s použitím tzv. adiabatické aproximace, kdy se řeší pohyb jader v rámci jednoho elektronového stavu. V případě dvojjadrových molekul se zpravidla jedná o numerické řešení jedné diferenciální rovnice. Jestliže není vhodné použít adiabatickou aproximaci, je nutné řešit pohyb jader s ohledem na neadiabatická spřažení dvou či více elektronových stavů buď v adiabatické reprezentaci, nebo diabatické reprezentaci. Potom je nutné numericky řešit soustavu spřažených diferenciálních rovnic. Kvantová dynamika může například pomáhat s řešením problémů týkajících se vzniku prvních molekul v raném vesmíru před 13 miliardami let, nebo s plánováním či interpretací současných velmi přesných experimentů týkajících se chladných molekul.

Na počátku vesmíru skončila nukleosyntéza s vyčerpáním volných neutronů (volný neutron se rozpadá na proton, elektron a elektronové antineutrino; střední doba života volného neutronu je 877,83 s [1]).



Ve vesmíru zůstala holá jádra vodíku (protony), deuteria, helia (alfa částice), lithia a možná i stopová množství jader beryllia a boru. S dalším poklesem průměrné energie fotonů začaly vznikat první stabilní systémy jader se zachycenými elektrony – nastala epocha rekombinace. První molekulární útvary ve vesmíru se ale začaly objevovat, až když průměrná energie fotonů klesla natolik, že umožnila vznik stabilních neutrálních atomů. Prvním stabilním neutrálním atomem byl atom helia, neboť má ze všech neutrálních atomů nejvyšší, tzv. první ionizační potenciál, tj. k odstranění jednoho elektronu z atomu helia v základním elektronovém stavu potřebujete dodat největší množství energie (24,59 eV [2], 1 joule je přibližně $6,24 \times 10^{18}$ eV). Protože ve vesmíru byl stále dostatek volných atomárních kationtů, tj. protonů (ionizační potenciál atomu vodíku je 13,60 eV [2]), D^+ , He^+ a Li^+ (první ionizační potenciál atomu lithia je 5,39 eV [2]), docházelo při dostatečném přiblížení nějakého kationtu k atomu helia k deformaci elektronového rozložení, a tudíž ke vzniku indukovaného dipólového momentu na atomu helia. I když atom helia má pověst nejméně reagujícího prvku, tak takové indukční síly vedou ke vzniku nekovalentních vazeb. Lze tedy předpokládat, že prvními



Párové a nepárové interakce v molekulárních systémech

Jiří Klimeš a Pavel Soldán

Katedra chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2; jiri.klimes@matfyz.cuni.cz

Výpočty vazebných energií mnohočásticových systémů jsou popsány z hlediska mnohočásticových rozvoů. V této souvislosti je role párových a nepárových příspěvků analyzována. Výhody a nevýhody přiblížení pomocí mnohočásticových rozvoů jsou diskutovány obecně, zatímco jejich použití je ukázáno na příkladech atomárních krystalů, molekul a molekulárních krystalů.

Vazebná energie patří k základním pojmům v chemické fyzice mnohočásticových systémů. Vyjadřuje množství energie, které je uloženo v mezičásticových vazbách systému v porovnání se vzájemně neinteragujícími částicemi (částicemi mohou být atomy či molekuly). K výpočtu vazebné energie V^{ab} dvoučásticového systému je třeba znát absolutní energie jak systému (E^{ab}), tak obou částic (E^a , E^b),

$$V^{ab} = E^{ab} - E^a - E^b.$$

Jednotlivé absolutní energie přitom lze určit použitím metod kvantové chemie, tedy přibližným řešením Schrödingerovy nebo Diracovy rovnice.

Obdobným způsobem lze určit vazebnou energii tříčásticového systému

$$V^{abc} = E^{abc} - E^a - E^b - E^c,$$

a takto můžeme postupovat k výpočtu vazebných energií systémů s vyšším počtem částic.

Ovšem přesné výpočty absolutních energií systémů, které obsahují velká množství částic, jsou výpočetně velmi náročné. Proto se hledají možnosti, jak určit vazebné energie takových systémů přibližnými metodami. Jednou z takových přibližných metod je mnohočásticový rozvoj. Jeho princip lze názorně vysvětlit na případě tříčásticového systému, kdy si jeho vazebnou energii V^{abc} vyjádříme jako součet vazebných energií dvoučásticových systémů (párová část) a příspěvku ΔV^{abc} (tříčásticová nepárová část)

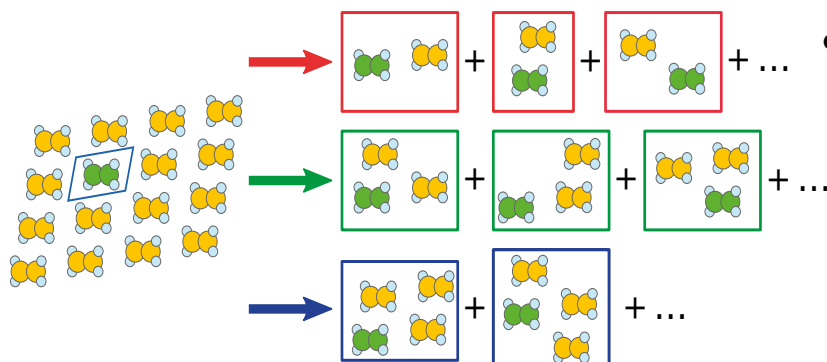
$$V^{abc} = V^{ab} + V^{ac} + V^{bc} + \Delta V^{abc},$$

což je v kombinaci s předchozími rovnicemi definiční vztah pro ΔV^{abc} .

Tento postup lze zobecnit pro mnohočásticové systémy, kdy je jejich vazebná energie vyjádřena jako součet párové části a nepárové části (viz obr. 1), která je součtem tříčásticových, čtyřčásticových a vyšších příspěvků

$$\sum_{ab} V^{ab} + \sum_{abc} \Delta V^{abc} + \sum_{abcd} \Delta V^{abcd} + \dots$$

Základem mnohočásticových rozvoů je tedy vždy párová část a přesnost přiblížení je určena tím, jak mnoho nepárových příspěvků je zahrnuto do výsledného rozvoje. Výhodou mnohočásticových rozvoů je, že v mnoha případech stačí uvažovat jen příspěvky do čtvrtého řádu a vyšší řády zanedbat. Tak se vyhneme náročným výpočtům absolutních energií celého systému. V případě konečných systémů částic (např. proteiny, zeolity či konečné krystaly) se malé množství extrémně náročných až nemožných výpočtů převede na velké množství lehce zvladatelných výpočtů. V případě nekonečných krystalů je situace složitější, neboť pro každou částici bychom měli uvažovat interakci nejen s okolními částicemi (přibližně nejbližších sousedů je příliš nepřesné), nýbrž se všemi v celém krystalu. Téměř vždy však příspěvky rychle klesají se vzdáleností mezi částicemi a je tedy



Obr. 1 Schéma mnohočásticového rozvoje pro krystaly, jehož všechny molekuly jsou symetricky ekvivalentní. V krystalu zvolíme jednu referenční molekulu (zvýrazněna zelenou barvou) a vytvoříme všechny dvojice, trojice a větší klastry molekul, které ji obsahují. Z nich získáme párové a nepárové příspěvky k vazebné energii, případně k dalším vlastnostem.



Kvantověchemické projekty protirakovinných léčiv s biomolekulami

Filip Šebesta a Jaroslav V. Burda¹

Katedra chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2;
 filip.sebesta@matfyz.cuni.cz, jaroslav.burda@matfyz.cuni.cz

Pomocí kvantové teorie molekul lze získat mnoho důležitých podpůrných informací o působení komplexů přechodných kovů v buněčném prostředí. V této souvislosti je možné uvažovat rovněž o způsobech účinku těchto komplexů v procesech spojených s léčbou různých forem rakovin. Z tohoto pohledu jsou významné především informace o kinetických a termodynamických parametrech, které naznačují, jak rychle a do jaké míry dané procesy probíhají, a dále znalost konkurenčních dějů a možných uspořádání, pokud je nutno předpokládat přítomnost různých strukturních forem.

1. Studium komplexů platiny

Cisplatina patří k prvním metalolécivům používaným v boji proti rakovině. Na základě studií B. Rosenberga [1, 2] byla uznána za účinnou látku agenturou FDA (*Food and Drug Administration*) roku 1978 [3, 4]. Z experimentálních studií [5–8] vyplynulo, že se cisplatina koordinuje v převážné míře ke dvěma po sobě jdoucím guaninovým nukleobázím a tím zablokuje replikační/transkripční proces dělení buňky ve stadiu mitózy. To v konečné fázi obvykle způsobí spuštění řízené smrti dané buňky – apoptózu [9]. Má-li být cisplatina aktivována, musí po průchodu membránou buňky nebo přesněji buněčného jádra zaměnit chloridové ligandy za vodu. Tento proces je sice termodynamicky nevýhodný (endergonický) v unimolární směsi, nicméně v prostředí jádra buňky je usnadněna velmi nízkou koncentrací chloridových iontů, takže se proces stává spontánní na základě Guldbergovy–Waagovy rovnováhy. Na proces výpočtu hydratační reakce byla soustředěna naše pozornost v sérii několika prací [10–15], kde byly sledovány jak termodynamické, tak i kinetické aspekty substitučního (S_N2) mechanismu.

a) Hydratace cis- a transplatiny

Základní předpisy velmi přesné G3 teorie [16] byly upraveny tak, aby je bylo možno z podstatné části aplikovat na komplexy platiny. Pseudopotenciálový přístup (s použitím Stuttgart-Dresden efektivních potenciálů pro vnitřní elektrony – SDD) byl doplněn o výpočty spin-orbitálních korekcí, korelace vnitřních elektronů (MP2(full)) byla nahrazena příspěvky polarizace pseudopotenciálů (CPP) a bazový soubor byl zvětšen o 3f

a 2g polarizační funkce platiny, jejichž exponenty byly zoptimalizovány metodou CCSD pro základní stav atomu. Všechny jednotlivé členy² v rámci G3 přístupu byly shrnuty do finálního vzorce:

$$\begin{aligned} \Delta E(\text{combined}) = & E[\text{MP4}/6 - 31G(d)] + \\ & + \Delta E(+) + \Delta E(2df, p) + \Delta E(CC) + \\ & + \Delta E(CPP) + \Delta E(G3l \text{ arg } e) + \Delta E(SO) \end{aligned} \quad (1)$$

a doplněny o příspěvky nukleárních stupňů volnosti $\Delta E(\text{ZPVE})$ do finální energie $\Delta G_0(G3)$.

Takovýmto výpočetním postupem byly stanoveny volné energie všech členů substitučních reakcí v plynné fázi, kdy jeden nebo dva ligandy v komplexech cis-/transplatiny, $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ a $[\text{Pt}(\text{Cl})_4]^{2-}$ byly nahrazeny hydroxidovým nebo akva ligandem. Na obr. 1 je zobrazeno schéma těchto reakčních energií. Červenou barvou jsou znázorněny exergonické procesy, kdy je třeba vzít v úvahu i změny náboje daného komplexu a skutečnost, že ve vodném/buněčném prostředí budou probíhat při odpovídající polarizaci okolí dané jeho relativní permitivitou, což tyto procesy do značné míry „přeškáluje“, obzvláště nese-li některý z reaktantů nebo produktů nenulový náboj. Nicméně se obvykle nezmění jeho energetický (ex-/endergonický) charakter. Lze konstatovat, že termodynamické chování cisplatiny a transplatiny je velice podobné a diaminodihydroxokomplex reprezentuje nejstabilnější variantu v reakčním schématu [10]. To napovídá, že tato forma nebude ochotna dále reagovat a souvisí s efektem pasivace cis-

² MP4 korekce polarizačních $\Delta E(2df, p)$ a difuzních funkcí $\Delta E(+)$, opravy vyšších řádů korelační energie – $\Delta E(CC)$, „kore“ polarizační členy pseudopotenciálu – $\Delta E(CPP)$ a MP2 opravy za rámeček (2df, p) DZ bazových souborů – $\Delta E(G3large)$.

¹ korespondenční autor



Vratná síla a periodický pohyb

Pavla Musilová

Ústav teoretické fyziky a astrofyziky, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno; pavla@physics.muni.cz

Kmitání či speciálně periodické děje mají své místo takřka ve všech fyzikálních disciplínách. V rámci fyzikálního vzdělávání bývá problematika periodických pohybů uváděna odděleně v jednotlivých fyzikálních předmětech (mechanika, elektřina a magnetismus, kvantová mechanika atd.). Základem všech periodických pohybů je však jednoduchý společný prvek – jsou způsobeny jistou „vratnou silou“.

Fyzikální vzdělávání
Zkušenosti učitelů a nové metody výuky

V tomto příspěvku předkládáme výklad problematiky jednorozměrného periodického pohybu na úrovni univerzitního bakalářského studia obecné fyziky. Doufáme, že text může posloužit učitelům působícím v bakalářském studiu ve snaze posilovat u studentů vědomí společných idejí jednotlivých fyzikálních disciplín, jakož i samotným studentům, kteří již absolvovali jednotlivé disciplíny fyziky, jež o periodických dějích pojednávají, k budování nadhledu nad problematikou při vlastním studiu, popřípadě při souhrnném opakování před státní zkouškou (na MU předměty Bakalářské repetitorium, Repetitorium fyziky). Není vyloučena možnost využití i na středních školách, především gymnáziích, kdy s problematikou vhodným způsobem seznámí zaujaté studenty učitel. Pokročilost textu však pravděpodobně omezí jeho středoškolské využití na specializované fyzikální semináře v maturitním ročníku. K zvládnutí textu je potřeba přiměřený matematický aparát: diferenciální a integrální počet funkcí jedné proměnné. S ním jsou studenti bakalářského studia fyziky a učitelství fyziky či studenti technických oborů dobře obeznámeni již po absolvování prvního semestru. Na některých středních školách studenti maturitních ročníků už také umějí derivovat a dokážou integrovat nepřiliš složité funkce.

„Jednorozměrným pohybem“ rozumíme pohyb popsáný jednou prostorovou proměnnou x (souřadnice, výchylka, úhlová souřadnice, vzdálenost, náboj, proud apod.). Výklad je založen na skutečnosti, že jednorozměrný periodický pohyb je zajištěn jediným, velmi jednoduchým požadavkem, aby „působící síla“ $F(x)$ směřovala vždy proti zobecněné souřadnici (proměnné) popisující pohyb. Jinak může být průběh $F(x)$ zcela libovolný. Uvádíme příklady z různých disciplín obecné fyziky a obecný vztah pro výpočet periody příslušného typu pohybu jak v obecné verzi, tak v harmonické aproximaci.

Úvod

Oscilátory jsou s výhodou používány ve středoškolské fyzice i v úvodu univerzitního studia fyziky jako modely usnadňující pochopení dynamiky periodických i aperiodických pohybů. Učební texty se obvykle soustředí na nejjednodušší modely, k nimž patří lineární harmonický oscilátor (tělísko na pružině, matematické kyvadlo v aproximaci malých výchylek apod.). Oscila-

tory jsou také oblíbené modely výzkumu v moderní literatuře z oblasti didaktiky fyziky – například v *European Journal of Physics* nebo *American Journal of Physics*. Jde většinou o různé typy kyvadel, jejichž netriviální popis vyžaduje hlubší matematické základy a dovednosti studentů. Příklady takových studií za posledních pět let čtenář snadno dohledá – je jich řada. Zmíněné studie jsou založeny na řešení pohybových rovnic konkrétních systémů od poměrně snadného standardního přístupu až po složitější matematické výpočty. Některé příspěvky obsahují i experiment (z tohoto důvodu je citujeme konkrétně [1–4]). Problémy řešené v publikovaných pracích jsou sice zajímavé, ale každý z autorů pojednává o nějakém specifickém aspektu kmitavého pohybu. Matematické požadavky některých z nich jsou navíc příliš náročné pro studenty v úvodní fázi univerzitního studia fyziky, o to víc pro středoškoláky. Na druhé straně zkušenost ukazuje, že pro obě tyto skupiny studentů je často obtížné porozumět i velmi jednoduchým otázkám vztahujícím se ke kmitavému pohybu, například pochopit dynamiku matematického kyvadla, či spíše dynamiku obecného křivočarého pohybu (viz např. [5, 6]).

Zdá se tedy vhodné hledat výukové přístupy, jež by mohly studenty přiblížit k základnímu porozumění podstatě periodického pohybu včetně odvození vztahů pro jeho základní charakteristiky, např. periodu. Základ všech (jednorozměrných) periodických pohybů v mechanice lze charakterizovat velmi jednoduše. Je jím tzv. *vratná síla*, jak níže ukážeme. Jako typický příklad periodických pohybů je na střední škole i v úvodním univerzitním kursu obecné fyziky obvykle uváděn lineární harmonický oscilátor. Na střední škole je primárně pojednána kinematika jeho pohybu pomocí promítání bodu pohybujícího se rovnoměrně po kružnici do směru jejího průměru, na základě kinematických úvah je pak získán silový zákon pro harmonickou sílu $\vec{F}(x) = -kx\vec{x}^0$, kde k je kladná konstanta a $\vec{x}^0$ jednotkový vektor ve směru osy x (viz např. [7, 8]). Na úrovni základního univerzitního kursu obecné fyziky se standardně řeší pohybová rovnice $m\ddot{x} = -kx$. Pružná síla Hookeova typu $F(x) = -kx$, lineárně závislá na výchylce systému (částice) z rovnovážné polohy, se jako příčina periodického kmitavého pohybu objevuje v řadě dalších příkladů. Dalšími typickými příklady jednorozměrného kmitavého pohybu v me-

Cumulonimbus, oblak známý i neznámý



Díl jedenáctý – Amatérská meteorologická společnost

Tomáš Prouza¹, Jana Žďárská²

¹ Český hydrometeorologický ústav, meteorologická stanice Pec pod Sněžkou, 542 21 Pec pod Sněžkou 290; tomas.prouza@chmi.cz

² Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 00 Praha 8, zdarskaj@fzu.cz

V Amatérské meteorologické společnosti se sdružují lidé, pro které je meteorologie dlouhodobým zájmem i koníčkem. V době vzniku spolku se jednalo o skutečné amatéry, postupem času se někteří jeho členové stali zaměstnanci Českého hydrometeorologického ústavu. Dnes jsou tak mezi členy pracovníci předpovědního či radarového oddělení nebo pozorovatelé na profesionálních meteorologických stanicích.

Milí čtenáři, přinášíme vám jedenáctý díl našeho seriálu o cumulonimbu. Budeme se věnovat *Amatérské meteorologické společnosti* (AMS) a jejím aktivitám. Pokusíme se společně nahlédnout, co je náplní jejich práce, a můžete se těšit i na perličku týkající se čápů aneb od pozorování oblaků ke sledování čápů.

AMS vznikla jako registrované občanské sdružení v květnu 2012, kdy v rámci Bouřkového semináře v Radostovicích proběhla jeho ustavující schůze. Kořeny AMS však sahají mnohem hlouběji, až do poloviny nultých let 21. století. Počínající éra internetu tehdy umožnila funkční komunikaci a spolupráci do té doby nezávisle fungujících meteorologů – amatérů. V letech 2005 a 2006 tak vznikly tři subjekty, jejichž pozdějším sloučením vznikla právě AMS.

V prvé řadě to byla *Amateur Stormchasing Society*, založená Honzou Drahokoupilem a Mirkem a Radkem Sedlmajerovými. Tato skupina se jako první zabýva-

la systematickým pozorováním a dokumentací bouřek v rámci terénních výjezdů. Později se k ní připojil i Lukáš Ronge, který se stal naprosto nepostradatelnou osobou pro další rozvoj především webových aplikací.

Dále došlo ke vzniku skupiny provozovatelů amatérských meteorologických stanic s názvem *Amatérská meteorologie v ČR*, spravované Tomášem Prouzou. Diskusní fórum této skupiny přežilo až do dnešních dní a obsahuje zajímavé historické údaje. Třetím projektem pak byl *SkyWarn CzechoSlovakia*, založený v červenci 2006 Davidem Rývou a Tomášem Púčikem. Jeho účelem bylo poskytnutí regionálních a specializovaných předpovědí konvektivních bouří, podobných těm, které v rámci Evropské laboratoře silných bouří (ESSL) produkuje ESTOFEX¹.

A právě Tomáš Púčik se později stal členem ESSL. Díky přátelským kontaktům výše uvedených osob probíhala již od počátku těsná spolupráce, usnadněná stejným pohledem na odbornou i amatérskou problematiku. V rámci Česka samozřejmě existovaly a existují i další organizace amatérských meteorologů, k jejich větší integraci však nedošlo.

Posledním krokem ke vzniku AMS byla především potřeba užší spolupráce s ČHMÚ (která probíhala v jistých formách již od roku 2006). Z praktických důvodů byl nutný vznik právnické osoby, jež následně měla možnost uzavírat oficiální smlouvy, týkající se například společných projektů či využití meteorologických dat.

Aktuálně má spolek 39 členů, kromě výše zmiňovaných profesionálů se většinou jedná o skutečné amatéry,



Obr. 1 Společná fotografie většiny členů AMS, pořízená v průběhu radostovického Bouřkového semináře v roce 2019. Vystaveným dokumentem je čestné uznání České meteorologické společnosti. Foto: L. Ronge

1 P. Zacharov, J. Žďárská: Cumulonimbus, oblak známý i neznámý. Díl sedmý – předpověď. *Čs. čas. fyz.* 75, 61–63 (2025).

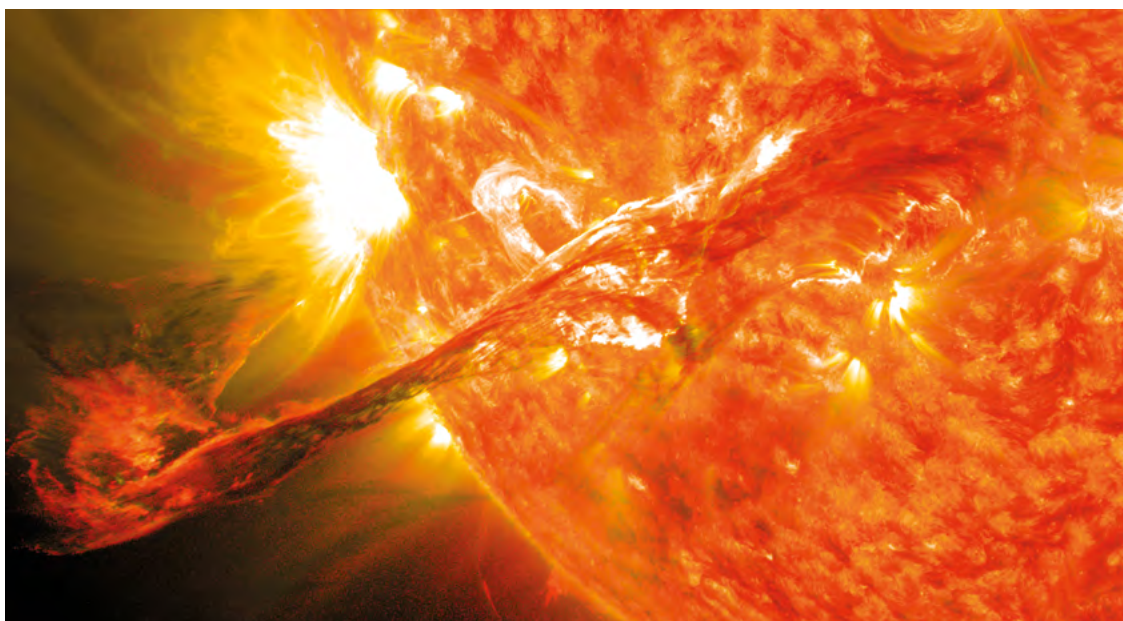
Sluneční erupce jsou jako Fénix z popela

Výzkum klouzavé sluneční rekonexe a důležitých procesů v koróně Slunce

Jana Žďárská

Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 00 Praha 8; zdarskaj@fzu.cz

Pro vědce a především sluneční astrofyziky je velmi důležité správně porozumět základním mechanismům probíhajícím na Slunci a jejich vlivu na meziplanetární prostředí včetně Země. „Pokiaľ chceme predpovedať slnečné erupcie a ich vplyv na medziplanetárne prostredie, vrátane našej technologickkej civilizácie, tak si myslím, že to nepôjde bez toho, aby sme porozumeli základným mechanizmom, ktoré v nich prebiehajú,“ připomíná Jaroslav Dudík.



Obr. 1 Eruptivní protuberance ze dne 31. 8. 2012, pozorovaná přístrojem SDO/AIA v kanálech 171 a 304 Ångström, na které tým J. Dudíka studoval projevy 3D rekonexe. Zdroj: NASA/GSFC a tým přístroje AIA, Creative Commons Attribution 2.0 Generic license

Sluneční astrofyzik Jaroslav Dudík z Astronomického ústavu AV ČR se zabývá především výzkumem slunečních erupcí pomocí družicových pozorování v extrémní ultrafialové (EUV) oblasti s vysokým časovým a prostorovým rozlišením. Jejich pomocí objevil, že teoreticky předpovězená klouzavá magnetická rekonexe je skutečně mechanismem uvolňování magnetické energie ve slunečních erupcích. „Študoval som vtedy iný jav, ale rozhodol som sa spracovať všetky dostupné dáta. Keď som z toho spravil animáciu, bolo

tam jasne vidno klzávu rekonexiu. Okrem toho existuje aj veľmi rýchla klzáva rekonexia, takzvaná rýchlokľzná. Teoreticky bola predpovedaná už pred dvadsiatimi rokmi. A my sme ju nedávno, po tých dvadsiatich rokoch, konečne našli. Videli sme klzanie, ktoré sa deje rýchlosťami, ktoré sú vyššie ako Alfénova rýchlosť. Na túto tému sme napísali v roku 2025 vedecký článok v *Nature Astronomy*,“ vysvětluje Jaroslav Dudík.

K výzkumu klouzavé rekonexe jsou využívána zejména družicová pozorování v UV a rentgenové oblasti.

Citlivější detekce biomolekul?

Klíčem je propojení nanokartáčů a optických vláken

Jana Žďárská

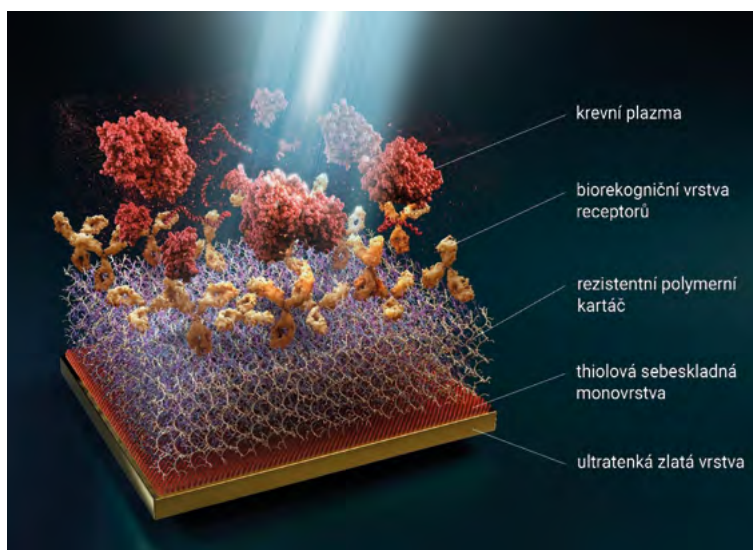
Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8; zdarskaj@fzu.cz

Vědkyně a vědci pod vedením Hany Lísalové ze Sekce optiky Fyzikálního ústavu AV ČR dosáhli významného vědeckého průlomu v oblasti optických vláknových senzorů. Poprvé se jim podařilo zkombinovat dvě pokročilé technologie – antifoulingové polymerní kartáče a senzory na bázi optických vláken, jejichž spolehlivost tím výrazně zvýšili. Tento inovativní přístup otevírá cestu k přesné detekci biomolekul i v tak náročném prostředí, jakým je například krevní plazma.

Nově zřízená Laboratoř funkčních biorozhraní se zaměřuje na prohlubování současných znalostí mezifázových biomolekulárních interakcí v jejich přirozeném prostředí a na vývoj nových funkčních biomateriálů pro různé medicínské aplikace. Výzkum se zabývá aktuálními tématy v oblasti biofyziky, biologie, molekulární biologie, chemického inženýrství a bioinženýrství. Zde probíhající vědecké přístupy zahrnují použití širokého spektra technik pro charakterizaci funkčních povrchů, kombinovaných s bioanalytickými, chemickými a biochemickými metodami. Tato vysoce interdisciplinární infrastruktura a znalosti umožňují vytvářet široké platformy pro řešení důležitých výzkumných úkolů. Zdejší výzkum zahrnuje také vývoj nových metodik pro zkoumání interakcí na biorozhraních, jako jsou nové přístupy k architektuře funkčních povlaků nebo studium dynamiky biomolekulárních interakcí na povrchu.

Zmiňovaná nová metoda detekce biomolekul byla vyvinuta ve spolupráci týmu Fyzikálního ústavu AV ČR a italského Institutu aplikované fyziky Nello Carrara v rámci mezinárodního konsorcia NABABAS a využívá speciální antifoulingový¹ terpolymerní kartáč (ATB) – polymerní povlak se speciálními vlastnostmi, který minimalizuje nežádoucí adsorpci biomolekul a umožňuje selektivní navázání cílových analytů.

Vědci tento koncept představili na modelové detekci protilátek a prokázali tím vysokou citlivost i odolnost nově upravených senzorů. Výsledky byly publikovány v časopise *Biomaterials Science*, kde se práce dostala



Obr. 1 Grafické znázornění antifoulingového terpolymerního kartáče, který minimalizuje nespecifickou adsorpci biomolekul z komplexního roztoku (např. krevní plazmy) a umožňuje selektivní navázání cílových analytů.

i na obálku čísla. „V našem týmu jsme vyvinuli metodu, která umožňuje optickým vláknovým senzorům pracovat s vysokou přesností i v náročných biologických prostředích, jako je krevní plazma. Klíčem k úspěchu byla nejen pokročilá technologie nanokartáčů (nanokartáč je polymerní vrstva, tvořená hustě propletenými řetězci makromolekul/polymerů, které svojí strukturou připomínají štětiny kartáče; tloušťka této vrstvy je v řádech nanometrů), ale také spolupráce v rámci týmu a s kolegy z Itálie. Společně se nám podařilo překonat dlouhodobou překážku v oblasti biosenzoriky, založenou na využití optických vláken – tj. rozvinout jejich využití při detekci biomolekul v komplexních prostředích a otevřít cestu k širšímu praktickému využití těchto citlivých senzorů,“ vysvětluje Hana Lísalová, vedoucí Laboratoře funkčních biorozhraní. „Pro člověka – vědkyni – je

¹ Termín „antifoulingový“ označuje vlastnost, která brání usazování biologických nečistot (tzv. foulingu) na povrchu materiálů. Tato technologie se používá ve vodním prostředí, např. v lodním průmyslu, ale také v lékařství a nanotechnologiích. V biosenzorech se antifoulingové vlastnosti využívají hlavně k tomu, aby se na povrchu senzoru neusazovaly nežádoucí molekuly a nesnižovaly tak jeho funkčnost a citlivost.

V záři hvězd

Jana Žďárská

Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 00 Praha 8; zdarskaj@fzu.cz



Hvězdárna Žebrák je lákavým centrem pro zájemce o astronomii a přírodní vědy. V roce 2004 obnovila svoji činnost a jedním z jejích zajímavých počínů je i videoseriál V záři hvězd, vysílaný pravidelně každou neděli v 9:00 na YouTube a následně na dalších sítích. V roce 2025 oslavili jeho tvůrci již 300. pokračování tohoto astronomického seriálu, a jak připomíná Vladislav Slezák, „astronomických témat pro náš seriál máme v rukávu opravdu nespočet a věříme, že máme šanci nabídnout našim divákům pomyslný takřka nekonečný astronomický příběh“.

V záři hvězd – název videoseriálu o astronomii, který již od roku 2020 natáčejí a pravidelně zveřejňují provozovatelé Hvězdárny Žebrák¹ Vladislav Slezák, Jan Florian, Marcel Berger a Ervín Woller. Vide seriálu zachycují dění v astronomii, kosmonautice a věnují se i okolí hvězdárny a města Žebrák. Původním a nadále trvajícím záměrem jeho tvůrců bylo informovat amatérské astronomy, příznivce Hvězdárny Žebrák a také všechny, které zajímá a baví vesmír, o dění v tomto oboru, ukázat jim místa, kde se astronomií zabývají, a občas nahlédnout i do samotného města Žebrák. „Málokdo má totiž možnost objet všechny hvězdárny republiky a podívat se, jak to v nich vypadá, nebo se dostat k zajímavým osobnostem či tématům,“ vysvětluje Vladislav Slezák.

V seriálu se už objevila řada unikátních míst, natáčelo se v mnoha hvězdárnách, planetáriích či kosmických laboratořích, mezi hosty a mluvčími bylo množství významných osobností, například Jiří Grygar,

¹ J. Žďárská: Znovuzrození hvězdárny Žebrák. Čs. čas. fyz. 71, 393–395 (2021).



Obr. 1 „Průvodkyní videoseriálu V záři hvězd se stala Kristínka, dnes Tína Slezáková. To proto, že Hvězdárnu Žebrák rádi navštěvují rodiče s dětmi, a tak jsme roli moderátora pořadu svěřili malé holčičce. Nyní alespoň od prvního dílu hezky vidíme, jak roste. Tehdy sedmileté dívence je dnes už třináct,“ připomíná Vladislav Slezák.



Obr. 2 V loňském roce Hvězdárna Žebrák oslavila úctyhodných 70 let od svého vzniku, dále 20 let obnovené činnosti a 200 let od pádu meteoritu Žebrák.

Soňa Ehlerová, Jakub Rozehnal, Jiří Dušek, Zdeněk Svěrák, Vladimír Remek či Andrew Feustel. Mnoho událostí i zajímavostí bylo zmapováno i ve městě Žebrák a jeho okolí. „Začali jsme v lednu 2020 díky lepší videotechnice. Tehdy o astronomii a kosmonautice mnoho videopodcastů neexistovalo, a protože jsme aktualizovali techniku, která to dokázala obstojně natáčet, řekli jsme si, že bychom mohli začít publikovat právě taková videa,“ vysvětluje Vladislav Slezák. „Kdo by si tehdy pomyslel, že přijde covid a videa se nám budou hodit ještě mnohem víc a bude to vlastně jediný způsob komunikace s našimi příznivci.“

Premiérový díl seriálu V záři hvězd publikuje Hvězdárna Žebrák již od začátku vždy každou neděli v 9:00 na YouTube. První díl série byl seznamovací a informoval o tom, že se takový pořad chystá. Vladislav Slezák tehdy poprosil svoji dceru Kristínku, zda by se ujala role průvodkyně pořadem. A vydrželo jí to dodnes. Všechny díly jsou pak ucelené v jednom playlistu na YouTube Hvězdárny Žebrák k dispozici na tomto odkazu².

Mezi tématy seriálu V záři hvězd figurují také informace či novinky přímo o Hvězdárně Žebrák. Ta již od roku 1954 funguje na jižním okraji města Žebrák a její často otevřená stříbrná kopule s dalekohledem

² <https://www.youtube.com/playlist?list=PL9IaBAS8jx-FC2qTnFZEI FYssqwTnG9Rmw>

Nalézání, objevování a realizace nového

Rozhovor s Eduardem Huliciusem z Fyzikálního ústavu AV

Eduard Hulicius¹, Jana Žďárská²

¹ Fyzikální ústav AV ČR, Cukrovarnická 10, 162 00 Praha 6; hulicius@fzu.cz

² Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 00 Praha 8; zdarskaj@fzu.cz

Z rozsáhlé plejády vědeckého zaměření Eduarda Huliciuse se poměrně těžko vybírají ty nejdůležitější pojmy, které by ho měly všeobecně představit a uvést. Ať už jde o jeho zaměření na polovodičové lasery, svítivé diody a laserové struktury či scintilátory a tranzistory s vysokou pohyblivostí elektronů založené na strukturách na bázi GaN, nebo o epitaxní technologie (dříve kapalná a molekulární, nověji i organokovová – MOVPE) a epitaxe prvků třetí a páté skupiny periodické tabulky pro přípravu heterostruktur a nanostruktur, jako jsou kvantové jámy a kvantové tečky. A ve víru těchto idejí skromně září noblesní badatel, popularizátor a pedagog Eduard Hulicius z Fyzikálního ústavu AV ČR.

Když jsem za ním cestovala na Fyzikální ústav AV ČR do Cukrovarnické, tušila jsem jen podle fotografie, kdo mě na vrátnici přijde přivítat. A jak známo, fotografie nabízí na člověka jen vnější pohled. O to milejší bylo skutečné setkání, prvních pár pronesených vět a gest. Nebylo pochyb, že jsem měla možnost setkat se a spolupracovat s opravdovou osobností vědy. S badatelem, jehož důležitost se neposuzuje počtem vědeckých hodnotí (i když těch má také pozhnaně), ale především jeho mimořádným zaujetím vědou.

■ **Jana Žďárská:** Když jsem se snažila do perexu našeho rozhovoru vypsát alespoň ty nejdůležitější oblasti vašeho vědeckého bádání, nebylo to rozhodně snadné, protože rozsah vaší výzkumné práce je skutečně velmi obšírný. A jistě i vaši kolegové nebo veřejnost posuzují vaše vědecké výsledky z různých úhlů. Co považujete vy osobně za váš nejdůležitější vědecký výsledek?

Eduard Hulicius: Na tuto otázku se mi těžko odpovídá. Z hlediska četnosti citací nebo impaktu časopisu¹ to není nijak závratné. Avšak z hlediska praktického významu našeho bádání je to už lepší. Odpověď si tedy dovoluji rozdělit do několika oblastí. Zajímavým výsledkem byly první prakticky použitelné infračervené elektroluminiscenční diody (IČ LED) a polovodičové



Obr. 1 Říjen 1949 a velká sklizeň ořechů na zahradě našeho domu v Praze na Hřebenkách.

¹ WoS h-index 17, počet cizích citací přes 750, Scopus h-index 18, citací přes 1 000

Obsah a autorský rejstřík

Čs. čas. fyz. svazek 75 (2025)

číslo 1	str. 1–86
číslo 2	str. 87–176
číslo 3	str. 177–264

číslo 4	str. 265–346
číslo 5 (Nobelova cena za fyziku 2024)	str. 347–436
číslo 6 (60 let Katedry chemické fyziky a optiky MFF UK)	str. 437–512

Obsah

Aktuality

Petr Kabáth: <i>Detekce a charakterizace exoplanet a role malých dalekohledů</i>	1	12
Stanislav Daniš: <i>Fyzikální ohlédnutí za rokem 2024 – část 1</i>	2	97
Stanislav Daniš: <i>Fyzikální ohlédnutí za rokem 2024 – část 2</i>	3	182
Pavel Kroupa, Eda Gjergo: <i>Rané galaxie přispívají k „dosvitu“ vesmíru</i>	4	268
Jan Valenta, Stanislav Daniš, Anna Fučíková: <i>Záhada svítícího podzemí. Zkoumání historických perzistentně-luminiscenčních materiálů</i>	4	270
Michal Zajaček: <i>Zlaté „bane“ vo vesmíre: o pôvode zlata a ako nám</i>		

v súčasnosti pomáha pri výskume vesmíru

Jaroslav Klokočník, Jan Kostecký, Aleš Bezděk: <i>Polární čepičky Měsíce aneb stydlivý Měsíček</i>	5	354
Jan Valenta, Petr Němec: <i>Šedesát let Katedry chemické fyziky a optiky na Matematicko-fyzikální fakultě Univerzity Karlovy</i>	6	440
Martin Kozák: <i>Ultrarychlé procesy v polovodičových materiálech a jejich nanostrukturách</i>	6	442
Lukáš Nádvorník, Eva Schmoranzarová, Petr Němec: <i>Ultrarychlá spintronika s magnety, co nedrží na lednici</i>	6	444
Karel Bouda, Tomáš Malina, Jakub Pšenčík: <i>Primární procesy fotosyntézy jako inspirace pro hledání nových způsobů využití sluneční energie</i>	6	449
Roman Dědic: <i>Luminiscenční detekce singletního kyslíku</i>	6	452
Lucie D. Augustovičová, Pavel Soldán: <i>Kvantová dynamika malých molekul</i>	6	461
Jiří Klimeš, Pavel Soldán: <i>Párové a nepárové interakce v molekulárních systémech</i>	6	464

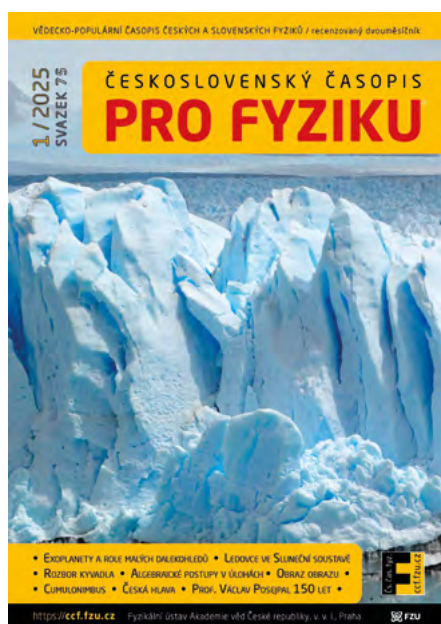
Fyzikální vzdělávání

Zbyněk Fišer, Zdeněk Bochníček: <i>Rozbor matematického kyvadla na středoškolské úrovni</i>	1	36
Pavla Musilová, Pavel Konečný, Jana Musilová: <i>Algebraické postupy (nejen) v analytických fyzikálních úlohách a naopak – 1</i>	1	42
Radka Křížová, Václav Pavlík: <i>České úspěchy na mezinárodních astronomických olympiádách</i>	2	123

Matěj Vaculčíak: <i>Mlžné komory v Malém Tibetu</i>	2	126
Pavla Musilová, Jana Musilová: <i>Algebraické postupy (nejen) v analytických fyzikálních úlohách a naopak – 2</i>	2	129
Václav Repáš: <i>Fyzikální soutěž Galaktická vědomostní výzva</i>	3	204
Zdeňka Koupilová: <i>Přiblížení základních principů kvantové fyziky bez použití matematiky I.</i>	3	206
Petr Bulušek, Pavla Musilová, Jana Musilová: <i>Hodgeův operátor a jeho praktické užití 1. část: Algebraický základ</i>	3	216
Zdeňka Koupilová: <i>Přiblížení základních principů kvantové fyziky bez použití matematiky II.</i>	4	278
Petr Bulušek, Pavla Musilová, Jana Musilová: <i>Hodgeův operátor a jeho praktické užití 2. část: Analytické aplikace</i>	4	288
Petr Bulušek, Pavla Musilová, Jana Musilová: <i>Hodgeův operátor a jeho praktické užití 3. část: Fyzikální aplikace</i>	5	382
Pavla Musilová: <i>Vratná síla a periodický pohyb</i>	6	476

Historie fyziky

Vladimír Štefl: <i>Rudolfinské tabulky planet</i>	2	134
František Jáchim: <i>Étienne Louis Malus (1775–1812) a rozšíření znalostí o polarizaci světla</i>	3	224
Vladimír Štefl: <i>Keplerův Doplněk k optice Vitella</i>	4	296
Jan Valenta: <i>Jáchymov, smolinec, radium a paní Skłodowska-Curie. Konference k 100. výročí návštěvy madame Curie v Československu</i>	4	307



Šťastné a veselé prožití svátků vánočních a do nového roku hodně zdraví,
úspěchů a příjemných chvil nejen s naším časopisem přeje Vaše redakce

2026
pour féliciter

Abstracts of selected articles

Martin Kozák: Ultrafast processes in semiconductor materials and their nanostructures

Ultrafast laser spectroscopy and time-resolved electron microscopy allow us to measure and visualize extremely fast phenomena in matter occurring on time scales down to femtoseconds. Quantum optics and optoelectronics utilizes these methods for investigation of ultrafast electron dynamics in condensed-matter systems, focusing on semiconductors, their nanostructures and 2D crystals. In this article, we describe the fundamental principles of these methods and give a few examples of recently published work in this direction.

Lukáš Nádvorník, Eva Schmoranzarová, Petr Němec: Ultrafast spintronics with magnets, that don't stick to the fridge

Compensated magnets are magnetic materials in which the magnetic moments of atoms are arranged in such a way that they compensate each other. Similar to conventional magnets, information can be written, stored and read back from them, but with a theoretically significantly larger capacity and with orders of magnitude higher frequency. Control of these ultrafast dynamics for magnetic arrangement is the fundamental mission of optical and time-resolved experiments, carried out in the Optospintronics Laboratory.

Karel Bouda, Tomáš Malina, Jakub Pšenčík: Primary processes of photosynthesis as an inspiration for new ways of solar energy utilization

The growing demand for sustainable energy resources has brought more attention to the study of photosynthesis. In this article, we provide a brief introduction into the topic, summarize its history, and describe the current status of research on primary processes of photosynthesis carried out at the Department of Chemical Physics and Optics of Charles University.

Roman Dědic: Luminescence Detection of Singlet Oxygen

Molecular oxygen in its excited singlet state plays a significant role in several processes, both in nature and in industry. Time-resolved detection of its weak near-infrared phosphorescence is an important tool for studying its production, interaction with the environment, and understanding its roles. In specific cases, delayed fluorescence can be advantageously used instead of direct detection.

Lucie D. Augustovičová, Pavel Soldán: Quantum dynamics of small molecules

In this article, quantum dynamics used for description of processes in the Universe and the laboratory is discussed. Special attention is paid to radiative

association, which is a fundamental process in the formation of molecules in rarefied astrophysical environments. From the very first molecule, HeH^+ , to more complex molecular ions, such as He_2^+ or CO , it plays a crucial role in gas cooling, the chemical evolution of the Universe, and the emergence of the first cosmic objects. Thanks to a combination of theoretical modelling and advanced experimental techniques, we are now gaining deeper insights into how the Universe "cooked up" its first molecules, and how this mechanism continues to influence molecular formation to this day.

Jaroslav Zamastil, Vojtěch Patkóš: Atomic spectroscopy and fundamental physics

In this article the significance of accurate spectroscopic measurements and calculations, and their connection to fundamental physics is highlighted. Regarding the radius proton puzzle, we illustrate what kind of discoveries and surprises this area of research brings to light.

Jiří Klimeš, Pavel Soldán: Pairwise additive and nonadditive interactions in molecular systems

Many-body expansions used in calculations of cohesion energy are described in this article. In particular the role of pairwise additive and nonadditive contributions is analysed. Advantages and disadvantages of many-body approximations are discussed in general, while their usage is illustrated for atomic crystals, molecules, and molecular crystals.

Filip Šebesta, Jaroslav V. Burda: Quantum-chemical projects of anticancer drugs with biomolecules

Using the quantum theory of molecules, it is possible to obtain crucial information about the action of transition metal complexes in the cellular environment. In this context, it is also possible to consider the modes of action of these complexes in processes associated with the treatment of various forms of cancer. From this perspective, information about kinetic and thermodynamic parameters, which indicate how quickly and to what extent given processes occur, and knowledge of competitive processes and possible arrangements, i.e., if it is necessary to assume the presence of various structural forms, are particularly important.

Pavla Musilová: Restorative force and periodic motion

Oscillations, or specifically periodic motions, have their place in almost all physical disciplines. In physics education, the issue of periodic motions is usually presented separately in individual physics disciplines (mechanics, electricity and magnetism, quantum mechanics, etc.). However, the essence of all periodic motions is a simple common feature, i.e., they are caused by a certain "reversing force".

VÝSTAVA VĚDA FOTOGENICKÁ



4. 12. 2025 — 31. 1. 2026

| GALERIE VĚDA A UMĚNÍ | **VSTUP ZDARMA** | NÁRODNÍ 3, PRAHA 1 |

An aerial photograph of a night festival in Žebrák. The scene is set on a grassy field with a town and a hill in the background. A tall, slender tower stands in the center. To the right, there is a small building with a dome. In the foreground, several large, illuminated models of celestial bodies are displayed, including a ringed planet, a yellow star, and several planets in various colors (orange, red, white, blue). People are seen walking around the models and sitting on the grass. The sky is dark with a hint of sunset or sunrise.

HVĚZDÁRIUM 2026

19.–20. června

The logo consists of three white, curved lines of increasing length, resembling a stylized horizon or a comet's tail.

Žebrák
Hvězdárna