

Zpráva o pokroku v realizaci projektu č. 1

Číslo projektu: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000778
Název: Centrum pokročilých aplikovaných přírodních věd (CAAS)
Příjemce: České vysoké učení technické v Praze
Sledované období: 1. 8. 2018 – 31. 3. 2019

Projekt Centra pokročilých aplikovaných přírodních věd (CAAS) má za cíl vybudovat obecnou univerzitní platformu, která integruje výzkumné aktivity v oblastech fyziky, matematiky, chemie a inženýrství pro jadernou technologii, materiálové vědy, fotoniky, detektorové technologie a v několika dalších progresivních oborech – to vše na bázi všestrannosti a širokého pokrytí výzkumných oborů z oblasti přírodních věd, které jsou dostupné na Českém vysokém učení technickém v Praze (ČVUT).

Fúze existujících excelentních týmů z rozličných fakult a partnerské instituce tvoří základ rozvoje současného výzkumu, díky možnosti interakce, výměny informací a kooperace v týmech pracujících ve špičkových výzkumných oblastech velkého významu, relevance a objevného potenciálu.

Tyto kroky zajišťují optimalizaci využití pracovní síly a vybavení dostupného na ČVUT a v partnerské instituci, a vytvoření a stabilizaci silného týmu mladých vědců, kteří později zajistí udržitelnost špičkového výzkumu a vzdělání v pokročilých přírodních vědách a jejich aplikacích.

CAAS tvoří efektivní prostředí pro mezioborový výzkum a zkombinuje fundamentální výzkum s více specializovanými výzkumnými odvětvími, což otvírá přístup k nejpokročilejším teoretickým nástrojům pro aplikované a orientované vědecké pracovníky.

Centrum pokročilých aplikovaných přírodních věd tvoří následující výzkumné programy, u kterých uvádíme informace o počáteční fázi realizace projektu:

Projekt Centra pokročilých aplikovaných přírodních věd (CAAS), v souladu se zněním návrhu buduje obecnou univerzitní platformu, která integruje výzkumné aktivity v oblastech fyziky, matematiky, chemie a inženýrství pro jadernou technologii, materiálové vědy, fotoniky, detektorové technologie a v několika dalších progresivních oborech – to vše na bázi všestrannosti a širokého pokrytí výzkumných oborů z oblasti přírodních věd, které jsou dostupné na Českém vysokém učení technickém v Praze (ČVUT).

V úvodních fázích projektu byly aktivovány týmy v duchu a popisu návrhu projektu. Byly vypsány konkurzy na nové vědecké spolupracovníky, kteří se postupně zapojili do činnosti programů a pracovních skupin. Postupně se dosáhla požadovaná kapacita a kompetence odborných skupin pro úspěšný postup při řešení projektu. Formou konzultací, odborných setkání a společných přednášek se upevňuje vnitřní koherenci jednotlivých skupin i vzájemná komunikace. V souladu s časovým harmonogramem řada skupin splnila slíbené první milníky nebo realizovala rozhodující vědecké kroky k jejich naplnění.

Pracovní skupiny, resp. její pracovníci začali publikovat výsledky dosažené pomocí projektu v odborných časopisech a prezentovat výsledky na národních a mezinárodních setkáních a konferencích. Výsledky jsou v souladu s navrženým programem prací. Eventuální odchylky od



programu, hlavně jejich časové rozvržení konzultovány s řídicím orgánem. Jsou připraveny nákupy investičních celků plánovaných v projektu.

Centrum pokročilých aplikovaných přírodních věd tvoří následující výzkumné programy, u kterých uvádíme informace o postupu řešení v počátečních fázích realizace projektu:

Matematika, matematická fyzika a teoretický výzkum (THEORY)

Koordinátor výzkumného programu - prof. RNDr. Pavel Exner, DrSc.

Podprogramy:

- A) Geometrie a spektrální vlastnosti kvantových systémů
- B) Kvantová optika a kvantová informace
- C) Kombinatorické a algebraické struktury, teoretická informatika
- D) Funkcionální analýza a operátorové algebry
- E) Algebra, uspořádané struktury a zobecněná teorie míry
- F) Matematické modelování dynamiky proudění
- G) Mechanika kontinua, modelování a simulace multifunkčních materiálů
- H) Dynamické procesy v nelineárních systémech
- I) Metody optimalizace, spolehlivost složitých systémů

Team A - **Geometrie a spektrální vlastnosti kvantových systémů** se věnoval následujícím problémům:

- V rámci studia kvantových systémů s interakcí nesenou varietami nižší dimenze byly analyzovány vlastnosti Dirakových operátorů s elektrostatickou a Lorentzovou skalární interakcí na δ slupkách (Exner, vykázaná publikace), a také Dirakových operátorů v jednorozměrném případě s tříparametrickou množinou bodových interakcí (Tušek) včetně aproximace regulárními potenciály.
- Pomocí vlastností ortogonálních polynomů z Askeyho schématu byla popsána třída vážených Hankelových maticových operátorů s explicitním řešením spektrálního problému (Štampach a Šťovíček, vykázaná publikace). Byl také rozpracován obdobný problém pro Carlitzovy ortogonální polynomy a s nimi související explicitně diagonalizovatelné Hankelovy maticové operátory.
- Byla analyzována nová třída ortogonálních polynomů vyjádřitelných pomocí q -Gaussových hypergeometrických řad objevujících se při analýze Isingova modelu s hyperbolicky klesající teplotou (Kalvoda a Štampach), konkrétně míra jejich ortogonalita, generující funkce a asymptotické chování magnetizace v tomto modelu.
- Dále byl navržen zobecněný lineární smíšený model pro odhadování parametrů malých oblastí založený na asymetrickém Gamma rozdělení (Hobza) a model kvantování oscilátoru pro speciální poměry tuhostí pružin (Chadzitaskos a Havlíček).

Práce zmíněná v prvním bodě obsahuje též diskusi nerelativistické limity, což v kombinaci s dalšími výsledky získanými během schvalování projektu znamená, že milník „Slabá vazba pro singulární Schrödingerovy operatory“ byl splněn.

Team B - **Kvantová optika a kvantová informace** se věnoval následujícím problémům:



- Byla prozkoumána možnost realizace kvantových procházek pomocí optické zpětnovazební Michelsonovy smyčky motivovaná použitím analogické Machovy-Zehnderovy smyčky. Ve spolupráci se skupinou profesorky Silberhorn byly realizovány první experimenty včetně studia propagace excitací v závislosti na počátečním stavu.
- Byly vyšetřeny vlastnosti kvantových procházek na sítích s vrcholy řádu 3 a následně i vlastnosti transportu na strukturách příbuzných fullerenu.
- Analýzou vlastností nelineárních zobrazení (purifikačních protokolů) bylo prokázáno, že v jistých režimech mohou vykazovat fázový přechod v závislosti na počáteční čistotě vstupního stavu (Jex, Gábris a Malachov, vykázané publikace).

Výsledek zmíněný v prvním bodě představuje důležitý krok ke splnění milníku „Kvantový Simulator, využívající Mach-Zehnderových interferometrů“.

Team C - **Kombinatorické a algebraické struktury, teoretická informatika** se věnoval následující problémům:

- Bylo započato zkoumání samopodobností pro množiny typu „cut-and-paste“ s využitím pro popis kvazikrystalů, jež bude pokračovat (práce bude vykázána po opublikování).
- Byla vyšetřována palindromická délka jako nově zavedená míra komplexity nekonečných slov, generovaná morfismy zavedenými ve fyzice. Toto téma bylo v plánu až za dva roky, ale ukázalo se být aktuálním (práce bude vykázána po opublikování).

Team D - **Funkcionální analýza a operátorové algebry** se věnoval následujícím problémům:

- Byl nalezen příklad Banachova prostoru, který je slabě kompaktně generovaný, ale nemá normovací Markuševičovu bázi.
- Byly charakterizovány topologie uspořádání na C^* -algebrách a jejich duálech.
- Byla dokázána ekvivalence měr nekompaktnosti na preduálech JBW^* tripletu a vyřešena s tím související Barton-Friedmannova domněnka o platnosti Grothendieckovy nerovnosti pro bilineární formy (práce budou vykázány po opublikování).

Prvně zmíněný výsledek – poznamenejme, že jde o problém otevřený po půl století – představuje důležitý krok ke splnění milníku „Nalezení strukturálních podmínek pro Banachovy prostory, které jsou kompatibilní s nelineárním vnořením“. Druhý výsledek představuje krok ke splnění následujícího milníku.

Team E - **Algebra, uspořádané struktury a zobecněná teorie míry** se věnoval následující problémům:

- Vyjasněna souvislost popisu kvantového systému s jeho dalšími atributy, např. částečně uspořádanou množinou jeho booleovských podsystémů (Hroch, Navara a Pták, vykázaná publikace).
- Nalezení prakticky použitelných technik vyjádření implikací pomocí jejich generátoru (Navara, vykázaná publikace).
- Důkaz toho, že každý stav na booleovské podlogice se rozšířit na Jauch-Pironův stav na celé logice, spolu s charakterisací booleovské logiky mezi svazovými logikami v termínech Jauch-Pironových stavů (Hroch a Pták, vykázaná publikace).

Team F - **Matematické modelování dynamiky proudění** se věnoval následující problémům:



Proudění nestlačitelné tekutiny, jedno i dvoufázové, popsané Navier-Stokesovými rovnicemi v oblastech s netriviální hranicí. Byl vyvinut model pro simulace proudění dvou nemísitelných tekutin a numerická metoda řešení tohoto problému založená na metodě konečných prvků a Galerkinově metodě (práce bude vykázána po opublikování).

- Proudění stlačitelné tekutiny: byly provedeny simulace turbinové a kompresorové mříže umístěné v kanálu aproximujícím stěny aerodynamického tunelu. Hlavní řešený problém pro nadzvukový vstup bylo nalezení vhodné kombinace divergence stěn kanálu a odsávání stěnou, byly testovány okrajové podmínky zajišťující předepsaný výtok a přítok hranicí.
- Proudění tekutin, reakční a fázové struktury v něm: zde byly zkoumány reakčně-difuzní procesy popsané soustavami parabolických parciálních diferenciálních rovnic, případně s advekčními členy. Dále byly zkoumány modely geometrických struktur popsaných parametricky v podobě soustavy degenerovaných parciálních diferenciálních rovnic a metody identifikace vektorových polí v proudícím médiu v medicínském kontextu (práce budou vykázány po opublikování).

Team G - **Mechanika kontinua, modelování a simulace multifunkčních materiálů** se věnoval následující problémům:

- Hlavní pozornost byla věnována mikromorfním modelům poškození materiálů. Byla provedena implementace příslušných numerických algoritmů do simulační platformy OOFEM a verifikace programu. Validační benchmark ukázaly dobrou shodu s experimentálními daty (práce budou vykázány po opublikování).
- Zároveň byly provedeny i přípravné kroky směřující k řešení dalších úkolů projektu, např. modelování transportních úloh.

Prvně zmíněné výsledky představují splnění milníku předpokládaného v této etapě projektu.

Team H - **Dynamické procesy v nelineárních systémech** se věnoval následující problémům:

- Byly vyšetřeny vlastnosti dynamického systému podmiňující jeho komplexní chování, především se zaměřením na entropii, topologické i měrově-teoretické mixování (Bobok, vykázaná publikace).
- Byla vyřešena soustava parciálních diferenciálních rovnic popisující dynamiku teplotně závislých procesů v hysterezních prostředích. Metody řešení byly ilustrovány na modelovém jednorozměrném příkladu podélně vibrující piezoelektrické tyče mixování (Krejčí, vykázaná publikace).
- Byl odvozen dynamický model pro deformovatelné porézní prostředí částečně vyplněné navzájem nemísitelnými tekutinami, kde interakce jednotlivých složek jsou popsány soustavou parciálních diferenciálních rovnic s hysterezními operátory (Krejčí, vykázaná publikace).
- Dále byly studovány mj. vlastnosti Boussinesqových rovnic se smíšenými okrajovými podmínkami (Kučera), soustavy dvou parciálních diferenciálních rovnic popisující difuzi dvou elektricky nabitých látek v jednorozměrném prostředí (Nekvinda) a otázka turbulentního proudění vazké nestlačitelné kapaliny (Skalák).

Team I - **Metody optimalizace, spolehlivost složitých systémů** se věnoval následující problémům:

- Byla rozpracována Bayesovská identifikaci parametrů několika různých nelineárních modelů. Konkrétně byl vyšetřen případ nespojitého modelu časové řady měřených teplot, kde se odehrává jedna či více náhlých změn.
- Dále byly identifikační postupy studovány na kalibraci tří materiálových modelů: (i) model Grassl-Jirásek pro popis chování betonu v tlakovém sevření, (ii) částicový model pro popis chování betonu v různých stavech namáhání a (iii) Mualem-van Genuchten model pro popis hydraulických vlastností nasycených zemin.

Kalibrace druhého ze zmíněných modelů představuje splnění milníku předpokládaného v této etapě projektu.

Částicová a jaderná fyzika (PARTPHYS)

Koordinátor výzkumného programu - Mgr. Jaroslav Bielčík, Ph.D.

Podprogramy:

- A) Vlastnosti jetů a jejich modifikace v prostředí QGP
- B) Produkce a interakce částic těžkých vůní
- C) Fotojaderné interakce v ultraperiferálních srážkách
- D) Fenomenologické modely efektů ve studené jaderné hmotě
- E) Monte-Carlo modelování produkce částic v hadronových srážkách
- F) Rydbergovy stavy atomů ve vysokoenergetickém plazmatu
- G) Jazyk v komunikaci mezi vědou, uměním a veřejností

V prvním monitorovacím období jsme zahájili řešení cílů programu částicové fyziky, který se zaměřuje na pochopení základních vlastností mikrosvěta a to zejména vlastností silné interakce studovaných pomocí hadronových srážek na urychlovačích. Konkrétně jsme se začali zabývat fyzikálními tématy: studium jaderné hmoty pomocí měření jetů a jejich vlastností, studium kvarkovo-gluonového plazmatu (QGP) pomocí částic obsahujících kvarky těžkých vůní, studium studené jaderné hmoty, studium ultraperiferálních srážek, simulace produkce částic a studium Rydbergových stavů atomů pomocí časově-rozlišené Fourierovsky transformované infračervené spektroskopie. Také jsme aktivně rozvíjeli spolupráci v rámci podprogramu „Jazyk v komunikaci mezi vědou, uměním a veřejností“.

Celkově jsme během prvního monitorovacího období uspořádali tři workshopy. Jeden workshop byl odborně zaměřen na studium těžkých kvarků a jetů. Tento workshop jsme zrealizovali ve spolupráci s Wigner Research Centre for Physics v Budapešti (Maďarsko) a Warsaw University of Technology ve Varšavě (Polsko), našimi dvěma strategickými vědeckými partnery. Další dva workshopy byly zaměřeny na komunikaci vědy a umění a uskutečnily se na Institutu Intermedií na ČVUT. Pravidelně jsme také pořádali odborné páteční setkání týmu částicové fyziky. V rámci těchto setkání jsme mj. uspořádali několik seminářů pro odbornou veřejnost.

V prvním monitorovacím období jsme prezentovali dosažené výsledky na mezinárodní konferenci Kruger 2018: „Discoveries at the LHC“ a jedna členka týmu absolvovala krátkou stáž na Univerzitě v Kodani (Dánsko) a na Univerzitě v Lundu (Švédsko). Publikovali jsme 45 článků z částicové fyziky



v rámci spolupráce se strategickými partnery v evropské laboratoři CERN a v Brookhavenské národní laboratoři v USA.

V řešení odborných témat jsme se zaměřili zejména na studium jetů obsahujících těžké kvarky produkované ve srážkách p+Pb při těžišťové energii 5.02 TeV na jednu nukleon nukleonovou srážku v experimentu ALICE. Na této analýze spolupracujeme s dr. Robertem Vertěsim z Wigner Research Centre for Physics v Budapešti. Rekonstrukce b-jetů je založena na detekci tříčásticového sekundárního vrcholu z rozpadu B mezonu. V současné době máme odhadnutou efektivitu a čistotu registrace B jetu pomocí sekundárního vrcholu a proběhla oprava spektra na rozmazání příčné hybnosti jetu vlivem detektorových efektů. V současné době pracujeme na odhadu systematických chyb. V experimentu STAR jsme studovali také těžké půvabné kvarky pomocí topologické rekonstrukce vrcholu rozpadu D mezonu. Pracovali jsme zejména na určení produkce nabitých a neutrálních půvabných mezonů.

V rámci experimentu ATLAS jsme v rámci pracovní skupiny ATLAS Standard Model zapojeni do měření účinných průřezů produkce jetů. V současné době probíhají práce s cílem změřit inkluzivní účinný průřez produkce jetů a dijetů na celém vzorku tzv. RunII dat z experimentu ATLAS při těžišťové energii 13 TeV o celkové integrované luminositě až 150 inverzních femtobarnů. Tato měření by měla navázat a zpřesnit předchozí výsledek publikovaný v loňském roce. Jedním ze stěžejních témat výzkumu kvarkovo-gluonového plazmatu je studium kolektivity v malých srážkových systémech. V březnu byl členkou týmu dokončen článek s touto tematikou, který byl zaslán k publikaci. V tomto článku jsme provedli hlavní analýzu fyzikálních dat a zodpovídali také za sepsání manuskriptu a vedení diskuzí

s ostatními členy experimentu ALICE. Měření anisotropického toku byla provedena pomocí nové metody na snížení kontaminace nežádoucích efektů, které jsou v malých srážkových systémech zastoupeny ve velkém měřítku. Výsledky byly srovnány s měřeními ve srážkách těžkých iontů a s výpočty teoretických modelů hadronových srážek. Výsledky zahrnuté v této publikaci významně přispívají k porozumění projevů kolektivity v malých srážkových systémech. Dalším tématem, kterým jsme se zabývali, byly fotonem indukované interakce v Pb-Pb ultraperiferálních srážkách v experimentu ALICE. Analyzovali jsme nová data z LHC, která nám umožní prozkoumat energetickou dynamiku gluonů v oblasti tzv. malých x , kde se očekávají projevy saturace gluonových hustot. Také jsme pracovali na teoretickém popisu těchto jevů v rámci přiblížení barevného dipólu při výpočtu Balitsky-Kovchegovovy rovnice. V rámci přiblížení barevného dipólu jsme také studovali difrakční elektroprodukcí těžkých vektorových mezonů v interakcích na protonových terčích. Dané teoretické studium bude sloužit následně jako základ pro další studium různých efektů v lepton-jaderných srážkách. S využitím formalismu barevného dipólu jsme odvodili vztahy pro účinný průřez se započtením efektů spinových rotací. Výpočty účinného průřezu byly provedeny pro elektroprodukcí charmonií a bottomonií a to nejen jejich základních (1S) stavů, ale také vyšších excitovaných stavů (2S, 3S). Podrobně jsme studovali různé příčiny teoretických neurčitostí a jejich vliv na přesnost výpočtů odpovídajících účinných průřezů. Testovali jsme vliv na variaci teoretických předpovědí, plynoucí

z různých modelů pro dipólový účinný průřez, vyskytujících se v literatuře. Provedli jsme detailní analýzu výtěžků kvarkonií jako funkci energie a virtuality fotonu Q^2 s využitím komplexního přístupu při určení vlnových funkcí charmonií a bottomonií na základě řešení Schroedingerovy rovnice pro různé interakční potenciály mezi těžkými kvarky. Kromě toho jsme provedli podrobnou analýzu vlivů efektů spinových rotací, Q^2 závislosti difrakční směrnice a veličiny hmotnosti těžkých kvarků na velikost výtěžku elektroprodukce kvarkonií. Na základě těchto výsledků jsme připravili vědeckou publikaci.

Dalším teoretickým směrem, který jsme rozvíjeli bylo studium produkce deutronů. Zkoumali jsme různé mechanismy produkce deutronů ze srážek těžkých iontů a jejich pozorovatelné důsledky. Na

jedné straně se totiž z dat zdá, že deuterony jsou produkovány v souladu se statistickým modelem produkce částic. Na straně druhé však deuterony vzhledem ke své nízké vazebné energii nemohou v horké hmotě vzniknout. Oba mechanismy produkce deuteronů jsme formulovali v rámci modelu „blast-wave“ a počítali jejich rozdělení v hybnostech. Také jsme studovali rozdělení částic vytvořených v jádro-jaderných srážkách pomocí metody pro analýzu eventů „Event Shape Sorting“ za účelem poukázat na její výhody oproti metodě „Event Shape Engineering“. Identifikovali jsme takové vlastnosti rozdělení částic, které jasně rozezná jenom metoda Event Shape Sorting. Rovněž jsme se zabývali vlivem statistických fluktuací na třídění eventů v uvedených metodách.

V rámci programu „Komunikace, věda a umění“ jsme připravili návrh artefaktu číslo 1, skleněné sochy, která bude komunikovat odborné veřejnosti jevy v částicové a kvantové fyzice.

Detektorová fyzika a technologie (DETE)

Koordinátor výzkumného programu - prom. fyz. Václav Vrba, CSc.

Podprogramy:

- A) Numerické modelování,
- B) Vývoj senzorů,
- C) Návrh ASIC a off-detector elektroniky,
- D) Architektura detekčního systému a aplikace,
- E) Testování a vyhodnocení kvality

Team A - Numerické modelování

V tomto podprogramu byly zahájeny práce na simulaci odezvy průchodu energetického fotonu pixelovým detektorem pomocí programu GEANT. Zajímají nás zejména dva efekty ovlivňující korektní stanovení koordinát místa průchodu primárního fotonu: roztékání a detekce náboje od interakce primárního fotonu a identifikace interakce sekundárního fluorescenčního fotonu. Práce na tomto úkolu pokračují.

Pomocí programu SYNOPSIS byly simulovány izolační charakteristiky guard-ringů pro různé dotační dávky tzv. p-stopů.

Team B - Vývoj senzorů

Byla provedena nezbytná měření a vyhodnocení kvality guard-ringů existujících křemíkových detektorů (viz Testování a vyhodnocení kvality). Na základě těchto měření a taktéž na základě simulací (viz Numerické modelování) byly stanoveny implantační dávky pro elektrickou izolaci jednotlivých guard-ringů. Taktéž byly provedeny úpravy v elektrických rozvodech senzorů umožňující svod závěrných proudů a zlepšit tak detekční charakteristiky při vysokých radiačních dávkách. Byly provedeny příslušné změny GDS file, upraven výrobní postup a senzory byly zadány do výroby. Výstupy tohoto podprogramu budou vstupem pro podprogram Testování a vyhodnocení kvality.

Team C - Návrh ASIC a off-detector elektroniky

Byly zahájeny práce na vývoji 8- a 10-bitového převodníku. K těmto činnostem se používá softwarového návrhového prostředí CADENCE. Jde o několikastupňový časově velmi náročný proces s mnoha kontrolními body ověřování správnosti postupu trvajícím několik měsíců. Také zde se velmi intenzívně využívá simulačních prostředků, které poskytuje softwarové prostředí CADENCE. Práce na tomto tématu pokračují.



Team D - **Architektura detekčního systému a aplikace**

V rámci tohoto podprogramu na bázi monolitického detekčního čipu X-Chip byl vyvinut detektor pro dozimetrii a identifikaci kosmického záření. Při návrhu byly mj. využity simulace pomocí programu GEANT. V pracích na dalším zdokonalení tohoto detektoru se pokračuje.

Team E - **Testování a vyhodnocení kvality**

Práce zahrnující toto téma se prolínají jednotlivými podprogramy směřující k vývoji nových detekčních součástí, jak vidno z výše uvedeného. Vedle toho provádíme funkční a radiační testy finálních součástí. V dotčeném období byly provedeny radiační testy čipu X-Chip pomocí ozařovače Co60 a pomocí ozařovače těžkých iontů různými svazky: Ne, Ar, Xe, atp. Výsledky těchto měření byly prezentovány na mezinárodní konferenci IEEE 2018 v Sydney a byly zaslány k publikaci v zahraničních impaktovaných časopisech.

Do činností tohoto podprogramu patří též práce s detektory vyvinutými s naší účastí, účast na analýze získaných experimentálních dat a publikace výsledků. Do této kategorie patří přiložené publikace.

Žádný z uvedených podprogramů neměl pro dané monitorovací období stanoven výzkumný cíl či milník.

Fyzika plasmatu (PLASMA)

Koordinátor výzkumného programu - prof. RNDr. Pavel Kubeš, CSc.

Podprogramy:

- A) Z-pinčový výboj jako výkonný zdroj více-MeV iontů a neutronů
- B) Vývoj organizovaných struktur v z-pinčových výbojích a jejich vliv na urychlení energetických částic
- C) Mechanismus urychlení a ztrát energetických elektronů a vývoj nových diagnostických metod pro tokamakové aparatury
- D) Praktické způsoby získání tritia pro první tokamakové fúzní reakce
- E) Termodynamika fúzní elektrárny a její chladicí systém
- F) Zdroje energetických částic z interakce laserového záření s plazmatem včetně testování nových pokročilých terčů
- G) Interakce laserového záření s plazmatem a absorpce v terčích inerciálního fúzního udržení zaměřené na alternativní způsoby zapálení
- H) Hydrodynamické simulace laserového plazmatu

Byly realizovány experimentální pobyty na aparaturách HAWK v Naval Research Laboratory v USA a PF 1000 v IPPLM v Polsku a probíhá zpracování jejich výsledků v rámci určení vývoje pinčového sloupce a jeho neutronové emise. Na aparatuře GOLEM proběhly první experimenty s ubíhajícími elektrony. Byla připravena knihovna pro využití kódu MCNP. Byla provedena příprava datových knihoven pro výpočty v tepelné oblasti. Byla provedena srovnávací analýza parovodních, heliových a superkritických CO₂ termodynamických cyklů fúzní elektrárny. Proběhly numerické studie interakce laseru s terčí o různém složení a dále testování alternativního částicového kódu a experimentální testování přípravy tenkých vrstev na terče. Pokračovala analýza výsledků z předchozích simulací pro využití na laseru PALS. Byl ukončen vývoj a testování lagrangeovské hydrodynamické metody v cylindrické geometrii. V uvedeném období bylo publikováno 8 článků v recenzovaných časopisech, z toho 5 s mezinárodní účastí a jsou připravovány 4 další.



Publikace:

1. V. Munzar, D. Klir, J. Cikhardt, B. Cikhardtova, J. Kravarik, P. Kubes, K. Rezac, Investigation of Magnetic Fields in Z-Pinches via Multi-MeV Proton Deflectometry, IEEE Trans. Plasma Sci. 46, 3891-3900, 2018. Článek popisuje vliv magnetického pole pinče na pohyb testovacích deuterionů (aktivita A, B)
2. D. Klir, A. Shishlov, V. A. Kokshenev, P. Kubes, et al, Acceleration of protons and deuterons up to 35 MeV and generation of neutrons in a megaampere deuterium gas-puff z-pinch, PPCF 61, 014018, 2019. Článek shrnuje parametry energetických deuterionů a neutronů (aktivita A, mezinárodní účast).
3. P. Kubes, M. Paduch, M. J. Sadowski, J. Cikhardt, B. Cikhardtova, D. Klir, J. Kravarik, V. Munzar, K. Rezac, E. Zielinska, E. Skladnik-Sadowska, A. Szymaszek, K. Tomaszewski, D. Zaloga, Evolution of the Pinch Column During the Acceleration of Fast electrons and Deuterons in a Dense Plasma Focus, IEEE Transactions on Plasma Science 47, 339 2019 (podskupina B, mezinárodní účast).
4. P. Kubes, M. Paduch, M. J. Sadowski, J. Cikhardt, B. Cikhardtova, D. Klir, J. Kravarik, R. Kwiatkowski, V. Munzar, K. Rezac, E. Zielinska, E. Skladnik-Sadowska, A. Szymaszek, K. Tomaszewski, D. Zaloga, Features of fast deuterons emitted from plasma focus discharges, Phys. Plasmas 26 (2019), 032702 (podskupina B, mezinárodní účast).
5. V. Svoboda, Operational Domain in Hydrogen Plasmas on the GOLEM Tokamak, 2019, 10.1007/s10894-019-00215-7 (podskupina C).
6. M. Zeman, M. Holec, P. Váchal. HerEOS: A framework for consistent treatment of the Equation of State in ALE hydrodynamics. Computers and Mathematics with Applications, 2019, In Press. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2018.10.014>. (podskupina H, publikace s mezinárodní účastí)
7. J. Nikl, M. Kucharik, J. Limpouch, R. Liska, S. Weber. Wave-based laser absorption method for high-order transport-hydrodynamic codes, Advances in Computational Mathematics, 2018. In Press. <https://doi.org/10.1007/s10444-019-09671-3> (podskupina H).
8. P. Kubes, M. Paduch, M. J. Sadowski, J. Cikhardt, B. Cikhardtova, D. Klir, J. Kravarik, V. Munzar, K. Rezac, E. Zielinska, E. Skladnik-Sadowska, A. Szymaszek, K. Tomaszewski, D. Zaloga, Evolution of the Pinch Column During Hard-X-ray and Neutron Emission in a Dense Plasma Focus, Journal of Fusion Energy, <https://doi.org/10.1007/s10894-018-0194-x> (podskupina B, mezinárodní účast).

Všechny aktivity cíle plánované ve Studii proveditelnosti pro období M1 – M8 jsou průběžně plněny.

Laserová fyzika a fotonika (LASE)

Koordinátor výzkumného programu - prof. Ing. Helena Jelínková, DrSc.

Podprogramy:

- A) Nová aktivní media a techniky pro generaci záření pevnolátkových laserů
- B) Interakce záření femtosekundových laserů s terči
- C) Teoretický výzkum fotonických a plazmových struktur
- D) Optoelektronika – fotonické struktury
- E) Optická spektroskopie



Team A - Nová aktivní media a techniky pro generaci záření pevnolátkových laserů se věnoval následujícím problémům:

Byly studovány spektrální a laserové charakteristiky záření nových aktivních prostředí - Er:YAP, Er:YLF a Fe:CdMnTe laseru v teplotní oblasti 80 až 300 K umožňující generaci nových vlnových délek od oku-bezpečné vlnové délky 1,6 μm až po infračervenou oblast 6 μm . Pomocí techniky generace Stokesových a anti-Stokesových přechodů byly generovány krátké impulsy z Nd:GdVO₄ laseru. Pomocí generace rozdílové frekvence z 1.064/1.203 μm záření Nd:YAG/CaCO₃ Raman laseru, parametrického anti-Stokes nanosekundového laseru na vlnových délkách 503, 507, and 508 nm využívajícího tangenciálního fázového synchronismu v krystalu CaCO₃ a použitím diodově buzeného laseru s novým krystalem Nd,Gd:SrF₂ v režimu buď simultánní dvoufrekvenční generace či v jednofrekvenčním režimu s přeladitelností v rozmezí 1047-1067 nm. Výzkumný cíl na toto období byl splněn.

Team B - Interakce záření femtosekundových laserů s terči se věnoval následujícím problémům:

Bylo postaveno zařízení pro měření hustoty plazmatu v kapiláře pomocí femtosekundového laserového impulsu. Index lomu závislý na hustotě plazmatu je měřen Mach-Zenderovým interferometrem. Byl proveden úvodní experiment. Pomocí numerických simulací byl studován vliv ablace stěn kapiláry na rekombinačně čerpaný EUV laser. Výsledky jsou zaslané k publikaci do časopisu „Physics of Plasmas“. Dále byla prováděna analýza emisních spekter z laserem generovaného plazmatu těžkých prvků (Rh, Mo, Zr) a výsledky jsou připravovány k publikaci. Byl zdokonalen model absorpce laserového záření v terčích (výsledek publikován v „Advances in Computational Mathematics“). Byl rovněž proveden experiment studující homogenizaci porézní pěny o nízké hustotě po jejím ohřevu intenzivním laserovým svazkem. Výsledky analýzy byly zaslány k publikaci do časopisu. Experiment samotný byl proveden v březnu 2019 a v současné době jsou zpracovávány jeho výsledky. Výzkumný cíl na toto období byl splněn.

Team C - Teoretický výzkum fotonických a plazmových struktur se věnoval následující problémům:

Byly studovány nové subvlnové struktury, zejména subvlnově strukturované mřížkové vlnovody (spolupráce Univerzita v Malaze a NRR v Ottavě); magnetoptické vlnovody (vývoj 3D numerického nástroje MOaRCWA) na bázi InSb-Si, založeném na hybridním přístupu; PT symetrické struktury založené na kombinaci zisku a ztrát a SUSY struktury; grafenové struktury podporující povrchové plazmony; nanoplazmonické struktury pro biosenzorické aplikace (nanočinky, nanodolmeny, metapovrchy), a další. Studovali jsme také nelokální plazmonické interakce pomocí hydrodynamických modelů (nelokální vlastnosti kovových vrstev, nelokální RCWA). Zabývali jsme se také možnostmi simulací optických vlastností grafénových vrstev, aktivně jsme implementovali dva přístupy (pomocí okrajové podmínky – vodivosti, resp. pomocí volumetrické vrstvy). Věnovali jsme se také interakci krátkých laserových pulzů se syntetizovanými zlatými nanočásticemi (syntéza, charakterizace a laserové ozařování nanočástic). Dále jsme se věnovali přípravě a charakterizaci vysoce teplotně odolných substrátů pro spektroskopii založené na povrchu zesíleném Ramanově rozptylu, na bázi přímých a inverzních opálů. Výsledky byly v monitorovacím období prezentovány na několika významných konferencích (Icton, SPIE, Nanocon), publikace jsou v přípravě, započala také příprava výběrových řízení. Výzkumný cíl na toto období byl splněn.

Team D - Optoelektronika – fotonické struktury se věnoval následujícímu problému:

byly testovány polymerní materiály pro aplikaci optických polymerních vlnodů, které budou sloužit pro návrh optických mnohavidových rozbočnic s velkým rozměrem vlnovodného jádra až 980 μm a



multivídrových struktur s rozměrem jádra 50 μm . Byly provedeny depoziční testy výroby optických vlnodů pomocí technologie 3D tisku. Pokračovalo provádění depozičních testů nanášení polymerních materiálů pro optické vlnodů. Byly taktéž prováděny depoziční testy s novými optickými elastomery polydimethylsiloxanu (PDMS). Bylo prováděno měření optických vlastností tenkých vrstev a vyrobených struktur a vyhodnocovány naměřené výsledky. Výzkumný cíl na toto období byl splněn.

Team E - Optická spektroskopie se věnoval následující problémům:

Optická spektroskopie. Byla měřena a vyhodnocena emisní a excitační spektra fotoluminiscence vrstev grafenu a série diamantových vrstev připravených metodou CVD pěstovaných na různých substrátech a s různým složením nosných plynů. Dále byla měřena a interpretována PL a PEL centra křemík-uhlíkové vakance. Výzkumný cíl na toto období byl splněn.

Publikace:

9. M. Frank, S. N. Smetanin, M. Jelínek, D. Vyhlídal, V. E. Shukshin, P. G. Zverev, V. Kubeček, „860 fs crystalline Raman laser at 1228 nm pumped by 36-ps, 1063 nm laser“ (zasláno k publikaci).
10. M. Vrbova, P. Vrba, A. Jančárek, M. Nevrkla, N. Bobrova, P. Sasorov, Wall ablation effect on the recombination capillary pinch pumping of EUV laser, Phys. Plasmas (zasláno k publikaci 2019).
11. V. Tikhonchuk, Y. J. Gu, O. Klimo, J. Limpouch, S. Weber, Studies of laser-plasma interaction physics with low-density targets for direct-drive inertial confinement schemes, Matter & Radiation at Extremes (zasláno k publikaci 2019).
12. V. Prajzler, P. Jašek, P. Nekvindova: Inorganic–organic hybrid polymer optical planar waveguides for micro-opto-electro-mechanical systems (MOEMS) Microsystem Technologies (přijato k publikaci 2019).
13. V. Prajzler, M. Knieta, P. Jasek: Properties of Large Core Polymer Optical Bend Waveguides. RADIOENGINEERING, VOL. 28, NO. 1, APRIL 2019 (přijato k publikaci 2019).

Disertační práce

K. Dragounová „Optická spektroskopie příměsí a defektů v materiálech perspektivních pro optoelektronické aplikace“, předložená disertační práce, 2019.

Konferenční sborníky

1. M.Nemec, R.Švejkar, J.Šulc, and H.Jelinkova, Spectral and Lasing Characteristics of Er:YAP Crystal in Temperature Range 80 to 300 K, in Advanced Solid State Lasers, OSA Technical Digest (online) (Optical Society of America), paper ATu2A.14, 2018.
2. R.Švejkar, J.Šulc, H.Jelínková, M.Čech, Temperature influence on spectroscopic and laser properties of Er:YLF crystal, In: Solid State Lasers XXVIII: Technology and Devices, Proc. SPIE 10896, p. 108961L-6, 2019
3. H.Jelínková, M.E.Doroshenko, M.Jelínek, J.Šulc, D.Vyhlídal, A.Říha, N.O.Kovalenko, A.S.Gerasimenko, Fe:CdMnTe laser generating 5.4 - 6 μm radiation, In: Solid State Lasers XXVIII: Technology and Devices, Proc. SPIE 10896, p. 108961V-7, 2019
4. S. N. Smetanina, M. Jelínek, D. P. Tereshchenko, V. E. Shukshin, L. I. Ivleva, V.Kubeček, Anti-Stokes nanosecond cyan 503, 507, and 508 nm generation at tangential phase matching in



- extracavity parametric Raman lasers based on crystals with different birefringence, Proc. SPIE, Prague, 2019 (v tisku).
5. M. Frank, S. N. Smetanin, M. Jelínek, D. Vyhliďal, V. E. Shukshin, L. I. Ivleva, P. G. Zverev, V. Kubeček, Efficient synchronously-pumped all-solid-state SrWO₄ Raman laser at 1178 and 1227 nm on single and combined Raman modes with 26-fold pulse shortening down to 1.4 ps, Proc. SPIE, Prague 2019 (v tisku).
 6. J. Limpouch, Laser interactions with low-density porous targets, Workshop on Laser Plasma Interaction Physics on ELI-Beamlines, Dolní Břežany, 5. 12. 2018.
 7. 11. K. Kouba, J. Proška, A method of preparation of SERS-active substrates based on self-assembled SiO₂ nanospheres, poster, 10th International Conference Nanocon 2018, Brno, Czech Republic, October 2018.
 8. F. Havel, P. Kwiecien, J. Proška, I. Richter, Advanced SERS substrates based on nanodumbbell plasmonic structures, poster, 10th International Conference Nanocon 2018, Brno, Czech Republic, October 2018.
 9. J. Čtyroký, P. Kwiecien, I. Richter, J. H. Schmid, P. Cheben, G. Wangüemert Pérez, I. Molina-Fernández, A. Ortega-Moñux, J. Litvik, M. Dado, Bragg gratings in subwavelength grating metamaterial waveguides, oral presentation, CPSOC 2018 - Czech-Polish-Slovak Optical Conference, Lednice, CZ, September 2018.
 10. P. Kwiecien, I. Richter, V. Kuzmiak, J. Čtyroký, J. Petráček, Novel effects and functionalities in subwavelength photonic and plasmonic structures, oral presentation, CPSOC 2018 - Czech-Polish-Slovak Optical Conference, Lednice, CZ, September 2018.
 11. I. Richter, Novel effects and functionalities in subwavelength photonic and plasmonic (nano)structures, invited, FNSPE student summer school SSCSSPM8, Nepomuk, CZ, September 2018.
 12. P. Kwiecien, I. Richter, V. Kuzmiak, J. Čtyroký, Nonreciprocal Magneto-optic Waveguiding Structures Studied with Magneto-optic Rigorous Coupled Wave Analysis, [10824-26] oral presentation, SPIE Photonics Asia, Beijing, People's Republic of China, October 2018.
 13. Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Nonlocal and quantum nanoplasmonic resonance effects: analytical and numerical treatment, [10824-33] oral presentation, SPIE Photonics Asia, Beijing, People's Republic of China, October 2018.
 14. P. Kwiecien, I. Richter, V. Kuzmiak, J. Čtyroký, Nonreciprocal Magneto-optic Waveguiding Structures Studied with Magneto-optic Rigorous Coupled Wave Analysis, [10927-40] oral presentation, SPIE Photonics West, San Francisco, CA, USA, February 2019.
 15. Milan Burda, Pavel Kwiecien, Ivan Richter, Nonlocal and quantum nanoplasmonic resonance effects: analytical and numerical treatment, [10921-54] oral presentation, SPIE Photonics West, San Francisco, CA, USA, February 2019.
 16. V. Prajzler, J. Závorka: Polymer large core optical splitter 1x2Y for high temperature operation. (recenzní řízení časopis Optical and Quantum Electronics).
 17. Byl přijat příspěvek na konferenci The 7th international conference on Advances in Electronic and Photonic Technologies - ADEPT 2019, která se bude konat 24-27. červa, 2019, ve Štrbském Plese, Slovensko. Příspěvek bude prezentovat J. Hybler.

Multidisciplinární centrum pro výzkum materiálů (MATE)

Koordinátor výzkumného programu - prof. Dr. RNDr. Miroslav Karlík

Podprogramy:

- A) Příprava materiálových struktur (technologická skupina)
- B) Pokročilá tribologie



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



- C) Aplikované biologické materiály
- D) Mikroelektronika
- E) Počítačové modelování materiálů
- F) Charakterizace materiálů

Team A - **Příprava materiálových struktur (technologická skupina)** – doc. Kalvoda

A.1. Vývoj postupů přípravy tenkých vrstev pomocí IJD

Postupy práškové metalurgie byly připraveny objemové vzorky hořčíkem dopovaných tetraheditů $\text{Cu}_{12-x}\text{Mg}_x\text{Sb}_4\text{S}_{13}$ a tuhých roztoků tetrahedit/tennantit $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4-x\text{As}_x\text{S}_{13}$ a $\text{Cu}_{10}\text{Co}_2\text{Sb}_4-y\text{As}_y\text{S}_{13}$ ($0 < x, y < 4$) a testovány jejich termoelektrické vlastnosti (Levinský et al. 2019a a Levinský et al. 2019b). Syntetické tetrahedrity představují skupinu relativně dostupných látek nadějnou z pohledu využití v termoelektrických aplikacích. Metoda IJD poskytuje vzhledem k jejich komplexní stechiometrii unikátní možnost přípravy tenkých termoelektrických vrstev těchto materiálů.

Stav napjatosti duplexní oceli po mechanickém opracování byl studován metodami XRD a Barkhausenova šumu (Čapek et al. 2018). Duplexní oceli jsou jedním ze substrátů testovaných ve spojení s metodou IJD ve vztahu k depozici bariérových (mechanických, tepelných, radiačních) vrstev. V současné době probíhají depoziční práce zaměřené na optimalizaci IJD po-stupů přípravy tenkých vrstev vysokoteplotních supravodičů typu YBaCuO , termoelektrických vrstev na bázi tetraheditů, teplotních bariérových vrstev CrW , tuhého roztoku HEA slitiny TaNbHfMoZr a plasmonických kovových vrstev.

A.2. Příprava molekulárních a polymerních filmů a multivrstevných struktur optimalizovaných pro využití v chemických optických senzorech

V minulosti byly pro základní polymerní materiály (PMMA, PS, PVC) úspěšně ověřeny postupy přípravy tenkých vrstev metodou IJD (Skočdopole et al. 2018). Základní vlastností připravených vrstev byla přítomnost polymerní sítě v důsledku excitace doprovázející depoziční proces. V současné době probíhá testování depozice dalších polymerních materiálů (PDMS, PTFE, PLA) na zvolené substráty (ocel, sklo) a analýza vlastností připravených vrstev. Vrstvy budou využity v přípravě masek pro přípravu plasmonických nanostruktur a dále matrice pro imobilizaci selektivních chemo-optických molekulárních a makro-molekulárních převodníků.

Metodou Langmuira a Blodgettové je testována příprava monomolekulárních vrstev založených na Cu^{2+} a Co^{2+} komplexech chinolinových ligandů využitelných v konstrukci chemo-optických převodníků plynného amoniaku (Aubrecht a Kalvoda 2017). V současnosti je testována a optimalizována depozice těchto vrstev na přímé a inverzní plasmonické nanostrukтуры.

Team B - **Pokročilá tribologie** (prof. Polcar)

Byly provedeny počítačové simulace na více úrovních za účelem určení vzájemných vztahů mezi vybranými 2D materiály metodami ab initio (elektronové struktury, chemické vazby, ...) a intrinsickým třením.

Dále byly studovány fyzikální detaily procesu disipace sil při „stick-slip“ pohybu hrotu na povrchu vzorku MoS_2 s extrémně vysokým prostorovým rozlišením (< 10 nm). Byl odvozen vztah mezi prvním anharmonickým členem v rozvoji potenciální energie, který nevyžaduje výpočet silových koeficientů třetího řádu. Prezentovaný rámec převádí paradigma výzkumu tření a disipace energie od



dynamických ke statickým studiím a tím vytváří základ pro design nových anizotropických tribologických a tepelně odolných materiálů (Cammarata et al. 2019).

Team C - **Aplikované biologické materiály** (doc. Kolenko)

C.1. Formulace konceptu nové generace detektorů založených na biomateriálech

Koncept nové generace detektorů spočívá v aplikaci makromolekul v senzorní vrstvě. Základní schéma experimentu je již známo, zbývá vyjasnit a následně experimentálně ověřit různá (převážně hydrogelová) prostředí, která přichází v úvahu pro tuto aplikaci. V návaznosti na další experimenty a chování makromolekul v senzorní vrstvě pak bude ještě v řešení technologická stránka věci zajišťující stabilitu a reprodukovatelnost měření.

C.2. Biofyzikální a strukturní analýza vhodných proteinů

Senzorní proteiny padají do dvou tříd: enzymy obsahující FAD a enzymy s globinovou doménou. U první třídy enzymů jsme již provedli dostatečné množství analýz, že v blízké době budeme schopni sestavit příspěvek k publikaci. U druhé skupiny enzymů jsme pouze pokročili tak, že na základě primárních výsledků navrhujeme další analýzy a zvažujeme cílené modifikace enzymů, které by mohly vylepšit jejich potenciální aplikaci pro konstrukci detektorů nové generace a mohly by být předmětem patentového řízení. Rovněž jsme testovali fragmenty DNA, neboť DNA je obecně stabilnější molekula, než pro-tein. Několik fragmentů jsme již dostatečně analyzovali a v současné době se nacházíme v konečné fázi přípravy publikace (Kolenko et al. 2019).

C.3. Výchozí biofyzikální analytické studie a studie signálové odezvy.

Studie signálové odezvy doposud neprobíhají, neboť ještě nejsou ukončeny analýzy cílových proteinů. Nicméně fyzikální část experimentu (příprava aparatury apod.) je již téměř u konce a v blízké době by mělo být vše připraveno k tomu, abychom se tímto bodem mohli začít reálně zabývat.

Team D - **Mikroelektronika** (doc. Voves)

D.1. Materiálová charakterizace, určení elektrických vlastností senzorů – vliv teploty a UV záření na jejich citlivost.

Připravené citlivé vrstvy byly charakterizovány mikroskopickými metodami (AFM, SEM), analytickými metodami (Ramanova spektroskopie, XRD) a elektrickými metodami (VA charakteristiky při různých teplotách a UV osvětlení). Pro realizaci senzorových vrstev byly využity struktury s vhodnými parametry a následně byla testována jejich citlivost na plyny při různých koncentracích, teplotách a intenzitě UV záření (Pošta et al. 2018).

D.2. Technologická realizace interdigitálních polí na jednom čipu. Výroba senzorů na bázi oxidů kovů a polymerních nanokompozitů

Metodou materiálového tisku byly připraveny první struktury interdigitálních polí. Elektrody jsou tvořeny tištěným stříbrem s následným sintrováním za zvýšené teploty. Následně jsou připravovány citlivé vrstvy různými metodami: Materiálovým tiskem, nanášením na odstředivce (spincoating) nebo kombinací tisku a následného růstu pomocí Chemical Vapor Deposition (CVD). Jako alternativní substráty pro přípravu citlivých vrstev byly pro srovnání použity také komerční interdigitální platformy Micrux.

D.3. Optimalizace komory pro testování polí senzorů plynů

Byla zdokonalena testovací aparatura umožňující měřit citlivost senzorů na přítomnost specifický plynů (CO₂, CO, NH₃, NO₂, NO, těkavé organické látky) smíšené s čistým dusíkem nebo se

syntetickým vzduchem v koncentracích řádu ppm. Nová testovací komora umožňuje automatizované měření časových odezev odporu sensorových vrstev v závislosti na koncentraci plynu, nastave-né teplotě a intenzitě UV osvětlení.

D.4. Vývoj selektivního depozičního procesu pomocí materiálového tisku.

V oblasti materiálového tisku byla optimalizována příprava různých substrátů (PET, kapton, sklo...) před tiskem pomocí čistících postupů včetně využití ozonového čištění. Pro analýzu smáčivosti připraveného povrchu byl vytvořen systém pro měření kontaktního úhlu. Byly připraveny postupy pro tisk zárodečných vrstev k následnému růstu vrstev nanodiamantu pomocí CVD. Pro analýzu vlivu UV záření na citlivost hybridních struktur ZnO/nanodiamant byl vyvinut fyzikální model pomocí TCAD systému Silvaco (bod 4), který potvrzuje experimentálně zjištěné významné rekce na UV ozáření, kterých je možno využít i pro měření intenzity UV záření (Náhlík et al. 2019)

D.5. Vývoj atomistických modelů sensorových struktur.

Pomocí simulátoru Synopsys/Quantumwise ATK jsou vytvářeny modely inter-akce mezi molekulami plynu a citlivou vrstvou na bázi kvantově-mechanických atomistických modelů. Zkoumána je zejména interakce mezi molekulou polyanilinu a molekulami NH₃ v různých konfiguracích a interakce molekul plynů s hybridní strukturou ZnO/nanodiamant. Na základě porovnání výsledků těchto simulací a provedených experimentů je připravována publika-ce v časopise Microstructures and Superlattices.

Team E - **Modelování materiálů** (doc. Seiner)

E.1. Implementace metod DFT a CalPhad pro simulaci HEA struktur a vlastností.

Na počítačovém klastru Hyperion FJFI ČVUT v Praze byly v monitorovaném ob-dobí instalovány SW nástroje pro pokročilé materiálové simulace kvantově-mechanickými metodami založenými na funkcionálu elektronové hustoty (DFT): Turbomol a VASP, a dále SW balík Open Calphad pro realizaci simulací rovnovážného termodynamického stavu vícesložkových systémů. V současné době probíhají testovací výpočty k ověření správné funkce programů a jejich knihoven v paralelním výpočtovém prostředí klastru (distribuce úloh mezi nody, optimalizace využití systémových zdrojů). V následujícím období budou prediktivní možnosti implementovaných SW nástrojů nejdříve využity k simulacím struktury a vlastností testovací HEA slitiny TaNbHfMoZr, jejíž vlastnosti jsou současně ověřovány experimenty na tenkých vrstvách připravených metodou IJD (objemový vzorek uvedené HEA slitiny byl připraven a laskavě poskytnut ÚFP AV ČR) a v další etapě k návrhům HEA slitin s novým složením.

E.2. Matematické modelování a numerické simulace fázových přechodů soli-dus-liquidus v jednodokomponentních látkách - formulace a analýza modelu.

Byl úspěšně otestován dříve vyvinutý software pro simulaci krystalizace materiálů, zahrnující dynamiku krystalických zrn, metodu fázového pole, diskrétní dynamiku dislokací a modelování povrchové difuze. Byla obhájena disertační práce (M. Kolář - Motion of Curves with the Application to Dislocation Dyna-mics), výsledky byly prezentovány na mezinárodní konferenci (Beneš et al. 2018) a zaslány k publikaci v časopise (Beneš et al. 2019).

E.3. Simulace SMA slitin na meso- a makro- škále: formulace modelu zahrnujícího fázovou transformaci, dvojčatění a plasticitu. Popis pohyblivost rozhraní austenit-martensit, formulace fenomenologického modelu v rámci zobecně-ných standartních pevných látek.

Byly vyvinuty mikrostrukturní modely transformačně-indukované plasticity a transformačně indukovaného plastického dvojčatění ve slitinách s tvarovou pamětí. Parametry modelů jsou v současnosti laděny na experimentální data, konkrétně měření na tenkých NiTi drátech namáhaných v tahu (ve spolupráci s FzÚ AVČR), na polykrystalech NiTi namáhaných v tlaku (ve spolupráci s ÚT

AVČR) a na monokrystalech a bikrystalech NiFeGaCo (ve spolupráci s University of Basque Country, Bilbao, Španělsko). Analýza polykrystalů NiTi je předmětem dizertační práce studentky M. Thomasové (KMAT FJFI, název práce: Elasticity polykrystalů slitin s tvarovou pamětí), vedené H. Seinerem, před-pokládáný rok předložení k obhajobě: 2021. Analýza NiFeGa(Co) je předmětem diplomové práce studentky K. Zoubkové (KIPL FJFI, název práce: Elasticita fe-romagnetických slitin s tvarovou pamětí v blízkosti kritického bodu), vedené H. Seinerem, která předložena k obhajobě v tomto akad. roce. Současně je na toto téma připravována publikace (pracovní název: Thermomechanical study of critical behaviour of NiFeGa(Co) single crystals) ve spolupráci s UBC Bilbao.

E.4. Fázové transformace ve slitinách Ti: popis kinetiky vzniku částic isothermální a atermální omega fáze v beta-stabilizovaných slitinách, simulace martenzitické mikrostruktury na úrovni monokrystalu, odvození fenomenologického modelu.

Byla provedena analýza experimentálních dat z měření vývoje elastických konstant v beta-stabilizovaných slitinách Ti15Mo, Ti5553 a TiMetal-LCB při anizotermálním žhání, se snahou separovat vliv fononového měknutí omega fáze od kinetiky vzniku omega-částic. Výsledky vykazují systematický trend, ze kterého lze usoudit, že při anizotermálním žhání dochází k jiné kinetice růstu při ohřevu a chlazení za stejných teplot. Ve spolupráci s prof. Benoitem Appo-lairem (IJL, University of Lorraine, Nancy, Francie) byl vyvinut phase-field model takového chování, který je v současné době porovnáván s experimentem. Toto téma je součástí dizertační práce studentky J. Nejezchlebové (KMAT FJFI, název práce: Charakterizace mikrostruktur v titanových beta-slitinách rezonanční ultrazvukovou spektroskopií.), vedené H. Seinerem, která bude předložena k obhajobě v tomto akad. roce.

Team F - Charakterizace materiálů (prof. Karlík)

F.1. Optimalizace 3D rekonstrukce morfologie lomových ploch.

Technikou AFM byl ve velkém rozlišení zmapován reliéf dvou testovacích lomových ploch. Následně byla provedena jeho 3D rekonstrukce pěti přístroji pokrývajícími tři metody (konfokální mikroskop, interferometrický mikroskop, speciálně upravený metalografický mikroskop). Výsledky bez výjimky vykazují rozlišení morfologických objektů v povrchu lomu o jeden až dva řády horší než hodnoty uváděné výrobcí přístrojů. Příčina tkví v tom, že přístroje jsou testovány na umělých modelových tělesech s dokonalými povrchy, zatímco povrch lomu je náhodně zvlněn. Současně jeho reflexivita je lokálně velmi proměnlivá, a to až k úplné absenci odraženého světelného signálu. - Na základě sady snímků testovacího povrchu lomu vytvořené konfokálním mikroskopem byl vyvíjen vlastní algoritmus 3D rekonstrukce, který dosahuje lepších výsledků než software výrobce.

F.2. Definice množiny parametrů (příznaků) popisujících 3D náhodné povrchové struktury.

Pro popis 3D morfologie povrchu lomu byl připraven výpočetní software, jehož výsledkem je až 2500 charakteristik tří typů: charakteristiky získané matematickou dekompozicí (spektrální, vlnková), parametry drsnosti a morfometrie povrchu a parametry topologie krajiny.

F.3. Definice cílů 3D fraktografické analýzy hlavních typů lomů.

Cílem 3D fraktografické analýzy je modelování souvislosti mezi morfologií povrchu lomu, vnějšími parametry lomového procesu a strukturou materiálu. Analýza devíti únavových lomů zaměřená na vztah mezi morfologií povrchu lomu a rychlostí šíření trhliny je tématem příspěvku "3D Textural Analysis of Fatigue Fracture Surfaces" přijatého pro konferenci Metallography & Fractography (Slovensko, duben 2019).

F.4. Vztah mezi mikrostrukturou a vlastnostmi materiálů.

Pomocí kombinace experimentálních metod (světelná mikroskopie, AFM) a výpočtů pomocí konečných prvků byl studován vznik vad (bublin, kráterů) na po-vrchu 6H-SiC v závislosti na dávce při implantaci iontů vodíku (Daghbouj et al. 2019). Mikrostruktura a mechanické vlastnosti slitin na bázi FeAl₂O₃Si₂O₇ při-pravených metodou mechanického legování a „Spark Plasma Sintering“ byly studovány pomocí elektronové mikroskopie, RTG difrakce a nanoindentace (Čech et al. 2019).

F.5. Experimentální uspořádání a metodologie pro charakterizaci a mikroskopickou korelaci mechanických, strukturních a chemických vlastností 2D a molekulárních materiálů.

Byly provedeny experimenty studující povrchové tření na 2D vločkách a vrstvách MoS₂ s prostorovým rozlišením pomocí měření laterálních sil působících na hrot v mikroskopu atomárních sil (AFM), který byl také pokryt MoS₂ vrstvou. Bylo optimalizováno technické uspořádání experimentu a nastavení měřících parametrů včetně parametrů měřící sondy pro získání spolehlivých výsledků s dostatečným rozlišením v prostoru a laterální síle. Dále byl studován vliv krystalické a amorfni fáze a také vlivu vlhkosti (9% – 95% RH). Experimentální data byla porovnána s výsledky simulací pomocí molekulární dynamiky na atomární úrovni (Serpini et al. 2019).

Ve spolupráci se skupinou tribologie byly též studovány fyzikální detaily pro-cesu disipace sil při „stick-slip“ pohybu hrotu na povrchu vzorku MoS₂ s ex-trémně vysokým prostorovým rozlišením (< 10 nm). Výsledky byly opět srovnány se simulacemi a shrnuty v článku Cammarata et al. 2019.

Dále byla vyvinuta metodika měření a experimentální uspořádání pro součas-né měření laterálních sil a Ramanovskou spektroskopii ve stejné mikroskopické oblasti pro srovnání tribologických a chemicko-strukturních vlastností in-situ. V tomto uspořádání se objevil problém optické a mechanické nestability měření. Metodika byla též aplikována na WS₂ jako další příbuzný 2D materiál. Zatím byly dosaženy jen předběžné výsledky.

Byly též zahájeny experimenty pro studium mechanických vlastností makro-molekul (biomolekuly, helicity) na povrchu HOPG a diamantu. Na experimentech a na vypracování vhodné metodiky měření a analýzy výsledných dat dále pracujeme. Zahájili jsme také práci na studiu účinku plazmatu, radiačních a teplotních vlivů na mechanické a chemicko-strukturní vlastnosti uhlíkových nanomateriálů a kompozitů.

Reference:

J. Aubrecht, L. Kalvoda (2016) Development of Ammonia Gas Sensor Using Op-timized Organometallic Reagent. Journal of Sensors, Volume 2016, Article ID 8425758, 8 pages.

M. Beneš, A. Žák and T.H. Illangasekare: Micro-scale model of thermomechanics in solidifying saturated porous media, oral presentation in the minisymposium J - Multiscale Modeling of Heterogeneous Layered Media, organizers: Jinghong Fan (Alfred University, USA), Ramesh Talreja (Texas A&M University, USA), Multiscale Materials Modeling MMM 2018, Osaka, October 26-November 3 2018

M. Beneš, M. Kolář, and D. Ševčovič: Curvature Driven Flow of a Family of Inter-acting Curves with Applications, submitted to Mathematical Methods in the Applied Sciences, 2019

A. Cammarata, P. Nicolini, K. Simonovic, E. Ukrainsev, T. Polcar: Atomic-scale Design of Friction and Energy Dissipation, Physical Review B (2019), accepted.



J. Čech, P. Haušild, M. Karlík, V. Kadlecová, J. Čapek, F. Průša and P. Novák, Mechanical Properties of FeAlSi Powders Prepared by Mechanical Alloying from Different Initial Feedstock Materials, *Matériaux et Techniques* (2019)

J. Čapek, K. Kolařík, M. Neslušán, Z. Pitrmuc, L. Beránek, K. Trojan, J. Němeček, N. Ganev, J. Kyncl, P. Mikeš (2018): Surface integrity after turning a duplex stainless steel with respect to tool geometry. *TRANSACTIONS OF FAMENA XLII-4*, 1-14, doi: 10.21278/TOF.42401

N. Daghbouj, B.S. Li, M.Karlík, A. Declémy, 6H-SiC blistering efficiency as a function of the hydrogen implantation fluence, *Applied Surface Science*, 466 (2019) 141–150.

P. Kolenko et al., Crystal structures of Chom22 and Hpar1: a mismatch induced conformational changes on A-DNA duplex structures. *Připravujeme pro Acta Cryst.*

P. Levinský, C. Candolfi, A. Dauscher, B. Lenoir, J. Hejtmánek (2019a): Thermoelectric Properties of Magnesium-Doped Tetrahedrite $\text{Cu}_{12-x}\text{Mg}_x\text{Sb}_4\text{S}_{13}$. *Journal of ELECTRONIC MATERIALS*, doi: 10.1007/s11664-019-07032-w

P. Levinský, C. Candolfi, A. Dauscher, J. Tobola, J. Hejtmánek, B. Lenoir (2019b): Thermoelectric properties of the tetrahedrite–tennantite solid solutions $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_{4-x}\text{As}_x\text{S}_{13}$ and $\text{Cu}_{10}\text{Co}_2\text{Sb}_{4-y}\text{As}_y\text{S}_{13}$ ($0 < x, y < 4$). *Phys.Chem.Chem.Phys.*, doi: 10.1039/c9cp00213h.

J. Náhlík, A. Laposa, J. Voves, J. Kroutil, J. Drahokoupil, M. Davydova: A high sensitivity UV photodetector with inkjet printed ZnO/nanodiamond active layers, *IEEE Sensors Journal* 2019, DOI: 10.1109/JSEN.2019.2893572

A. Pošta, J. Náhlík, A. Laposa, J. Voves: Flexible Ammonia Gas Sensor Based on Polyaniline, *Nanocon 2018*, Brno.

E. Serpini, A. Rota, S. Valeri, E. Ukraintsev, B. Rezek, T. Polcar, P. Nicolini: Nanoscale frictional properties of ordered and disordered MoS_2 , *Tribology International* (2019), accepted

J. Skočdopole, L. Kalvoda, P. Nozar, M. Netopilík (2018): Preparation of polymeric coatings by ionized jet deposition method. *Chemical Papers* 72(7), 1735-1739.

Jaderná chemie (CHEMISTRY)

Koordinátor výzkumného programu - doc. Ing. Václav Čuba, Ph.D.

Podprogramy:

A) Pokročilé materiály

B) Pokročilé procesy

C) Chemická podpora pro materiálový výzkum

Všechny programy byly zahájeny ve spolupráci FJFI a UFCH od 1. 8. 2019 – Pokročilé materiály (vedoucí Jan Bárta FJFI), Pokročilé procesy (vedoucí Martin Ferus UFCH), Chemická podpora (vedoucí Barbora Drtinová).



Dosud bylo přijato k tisku 10 publikací v časopisech s IF (ze slíbených 55), 2 publikace jsou v recenzním řízení a 3 publikace budou podány v nejbližších měsících. Lze tedy očekávat, že tento indikátor bude bez problémů naplněn.

Team A - **Pokročilé materiály** se věnoval následujícím problémům:

- Syntéza pokročilých materiálů
- Byly zahájeny práce na scintilačních nanomateriálech na bázi ZnO:Au, dále CsPbBr₃ a YSO/LYSO:Ce. Kromě toho byla zahájena studie přípravy perovskitů v podobě tzv. tenkých vrstev (tloušťka do 500 nm).
- Podařilo se připravit materiály ze všech jmenovaných oblastí, vykazující slibné luminiscenční vlastnosti. V této oblasti byly přijaty 4 publikace.
- Výzkumný cíl je průběžně plněn.
- Příprava nanostrukturovaných nosičů
- K tomuto účelu byly připraveny již dříve syntetizované materiály na bázi LuAG:Pr a nově také YSO:Ce. Tyto materiály byly modifikovány povrchovou vrstvou (SiO₂) pro navázání biofunkčních skupin.
- Do této oblasti patří jedna přijatá publikace.
- Výzkumný cíl je průběžně plněn.
- Příprava biokonjugovaných nanomateriálů
- Bylo zahájeno testování konjugace nanočásticových nosičů s porfyrinem PpIX.
- Výzkumný cíl je průběžně plněn.

Team B - **Pokročilé procesy** se věnoval následujícím problémům:

- Chemie sloučenin CHNO
- Byla provedena úvodní studie vlivu ionizujícího záření na radiolýzu formamidu v prostředí jílových minerálů.
- V současné době je připravována publikace na toto téma.
- Vliv vychytávačů OH radikálů na růst ozářených mikroorganismů
- Byla zahájena studie vychytávací účinnosti vybraných sloučenin (alkoholy, mravenčany) v systémech obsahujících kvasinky i bakterie.
- V této oblasti byly publikovány celkem 3 výstupy, další se připravují.
- Výzkumné práce v této oblasti postupují v souladu s plánem.
- Studium chování analogů supertěžkých elementů
- Byly provedeny orientační studie pro systém SISAk.
- Byly přijaty dvě publikace.

Team C - **Chemická podpora pro materiálový výzkum** se věnoval následující problémům:

- Tým chemické podpory se zapojuje do řešení problematik ostatních týmů. Členové skupiny mají podíl na dosažených výstupech.
- V přípravě je jedna publikace.

Plánované publikace:

1. J. John, duben 2019, Recycling of isotopically modified molybdenum from irradiated CerMet nuclear fuel: part 1 — concept design and assessment, DOI 10.1007/s10967-019-06456-2



2. L. Procházková, V. Čuba, J. Bárta, červen 2019, Photochemical synthesis of nano- and micro-crystalline particles in aqueous solutions, DOI 10.1016/j.apsusc.2019.02.087
3. K. Čubová, V. Čuba, květen 2019, Synthesis of inorganic nanoparticles by ionizing radiation - a review, DOI 10.1016/j.radphyschem.2019.02.022

Instrumentální radiační analytické metody (IRMA)

Koordinátor výzkumného programu - prof. Ing. Ladislav Musílek, CSc.

Podprogramy:

- A) Detektory záření
- B) Instrumentální analytické metody
- C) Analýza materiálů užívající difrakci záření

Program IRMA má tři navzájem související součásti, orientované na detektory záření, principy radiačních analytických metod a na rentgenové a neutronové difrakční metody. Primárním úkolem v počáteční fázi projektu bylo rozšířit dosud omezené instrumentální možnosti pracovníků programu. Zároveň probíhaly v souladu s návrhem projektu experimentální práce a vyhodnocování jejich výsledků.

V rámci podprogramu **Detektory záření** byly konkrétně prováděny následující práce:

- Budování aparatury pro měření kinetiky scintilační odezvy s vysokým rozlišením.
- Rozšíření aparatury na měření světelného výtěžku.
- Příprava podkladů pro zakoupení life-time spektrofluorometru.
- Zahájení vývoje nových plastických scintilačních materiálů.

Aparatura pro měření kinetiky scintilační odezvy vyžaduje zdroj ultrakrátkých záblesků záření X, jejichž délka by neměla přesahovat několik málo set nanosekund. V první fázi byli hledáni možní dodavatelé. Tato fáze ukázala, že s největší pravděpodobností dokáže požadavkům vyhovět pouze excitační část přístroje PicoXSpec firmy Hamamatsu, jejíž klíčovou součástí je světlem buzená rentgenka N5084. Firma Hamamatsu potvrdila, že zařízení je schopna dodat a sdělila, že výhradním zástupcem pro Českou republiku bude v případě tohoto zařízení firma OPTIXS s.r.o. V následující fázi řešitelé přistoupili k vypracování technických a finančních požadavků. Ty jsou nyní formulovány a předány právníkům firmy Tögel, která na jejich základě vypracuje výzvu k účasti na veřejné zakázce.

Aparatura pro měření světelného výtěžku umožňuje v současné době buzení odezvy záření alfa či gama a detekci scintilačních fotonů pomocí hybridního fotonásobiče. Je plánováno rozšířit aparaturu o možnost buzení odezvy neutrony a možnost použití jiných fotodetektorů, jmenovitě MPPC (Multi-Pixel Photon Counter) a APD (Avalanche PhotoDiode). V této fázi řešení projektu byly práce zaměřeny na rozšíření o nové typy fotodetektorů. Byly vybrány a objednány vhodné APD a MPPC; jejich dodání je očekáváno v nejbližších dnech. Rovněž byly objednány a dodány další elektronické součástky pro tuto aparaturu, především kvalitní kompatibilní předzesilovače.

V druhé půli monitorovacího období byla též věnována pozornost formulování požadavků na life-time spektrofluorometr, který bude poskytovat údaje o opticky buzeném dosvitu. Rozdíl oproti aparatuře pro měření scintilační kinetiky spočívá v tom, že sice neposkytuje přímé informace o užitných parametrech, ale vzhledem k možnosti buzení specifických stavů umožňuje snáze získat informace poskytující vzhled do scintilačního mechanismu. V tomto případě se nejedná o zařízení vyloženě unikátní (na rozdíl od světlem buzené rentgenky). Proto byla přípravě výběrového řízení na excitační část aparatury pro měření scintilační kinetiky věnována přednostní pozornost. Nicméně na konci



monitorovacího období byly formulovány požadavky i na spektrofluorometr a též byly předány firmě Tögel, který vypracuje příslušnou výzvu.

V rámci projektu bylo připravováno několik publikací. Publikace „Effect of Ca²⁺ co-doping on luminescence and scintillation properties of Lu₃Al₅O₁₂:Ce epitaxial garnet films“ je v druhém kole recenzního řízení v časopise Optical Materials. K vypracování této publikace byla využita již zmiňovaná aparatura pro měření světelného výtěžku, který je důležitým parametrem ovlivňujícím přesnost stanovení okamžiku interakce. Dále byly připravovány publikace s pracovními názvy „Thermoluminescence properties of LuAG:Ce,Mg epitaxial films“ a „Thermoluminescence properties of LGGAG:Ce,Mg epitaxial films.“ Termoluminiscenční měření jsou velmi účinným nástrojem pro zkoumání pastí, přičemž právě pasti jsou asi nejvýznamnějším fenoménem, jenž může být zodpovědný za zhoršení/prodloužení kinetiky scintilační odezvy scintilátorů proti teoretickým možnostem. Tyto publikace budou dokončeny a podány v průběhu dalšího monitorovacího období.

Jako další součást podprogramu Detektory záření byl zahájen vývoj nových plastických scintilačních materiálů. V tradičních plastických scintilátorech je využívána směs primárních a sekundárních posunovačů emise (např. PPO/POPOP), pomocí které je postupným intermolekulárním „through-space“ Försterovským přenosem excitační energie převáděna scintilační odezva polymerní matrice z blízké ultrafialové oblasti až do zelené oblasti viditelného světla, kde se nachází maximum citlivosti používaných fotonásobičů. Cílem výzkumu je zvýšení účinnosti scintilátorů nahrazením směsi posunovačů emise jedinou vícechromoforovou sloučeninou, která v sobě bude spojovat vysoce účinný, tzv. „through-bond“, intramolekulární přenos excitační energie a s ním spjatý velký pseudo-Stokesův posuv, vysoký účinný průřez pro absorpci v blízké UV oblasti a vysoký kvantový výtěžek fluorescence v zelené oblasti vlnových délek. Za tímto účelem bylo navrženo několik struktur založených na 1-aminopyrenových donorech a 3,4,9,10-perylentetrakarboxydiimidových akceptorech spojených 1,3,5-triazinovým konjugovaným můstkem. Pro tyto struktury byly provedeny kvantově-chemické výpočty jejich vlastností v základním elektronovém stavu pomocí DFT metod. Zároveň byly ve spolupráci s Univerzitou Pardubice navrženy syntetické postupy pro přípravu těchto látek a bylo zahájeno jejich předběžné experimentální ověřování. Detailní mechanismus „through-bond“ intramolekulárního přenosu excitační energie není dosud vyjasněn. Nedávné molekulárně-dynamické simulace (DOI: 10.1021/acs.jpcl.7b00259) ukázaly na možný příspěvek neadiabatického přechodu, kdy v bichromoforové molekule dojde během několika femtosekund po fotoexcitaci donoru k tranzientní delokalizaci excitační energie a následné postupné relaxaci do stavu s excitovanou akceptorovou částí molekuly. Takováto ultrarychlá dynamika excitovaného stavu by se podle Hellerovy teorie měla odrazit v intenzitách pásů rezonančního Ramanova spektra dané molekuly. Proto bylo provedeno srovnání rezonančních Ramanových spekter vícechromoforových sloučenin založených na 1-aminopyrenových donorech s přítomností, resp. absencí 3-aminobenzanthronového akceptoru při vlnové délce budícího laseru 355 nm, odpovídající absorpčnímu pásu donoru. Ačkoli u látek s akceptorem byl tranzientní absorpční spektroskopii prokázán „through-bond“ přenos excitační energie probíhající na časové škále kratší než 200 femtosekund, v rezonančních Ramanových spektrech se přítomnost akceptoru nijak neprojevuje a pozorované rezonančně zesílené vibrační módy lze s pomocí DFT výpočtů jednoznačně přiřadit výhradně 1-aminopyrenovému skeletu. Výsledky této studie byly zveřejněny na 9th International Conference on Molecular Electronics (ELECTMOL 2018) konané v Paříži.

Vedoucí podskupiny Detektory záření navštívil v listopadu v rámci jiných povinností Shanghai Institute of Ceramics Čínské akademie věd. Při této návštěvě zajistil pro projekt CAAS vzorky scintilačních keramik LuAG:Ce,Mg, LuAG:Ce,Ca a LuAG:Ce,Ca,Mg.



V podprogramu Instrumentální analytické metody proběhly nejdříve přípravy vzorků a gama spektrometrické laboratoře (kalibrace spektrometru) na následné experimenty neutronové aktivační analýzy (NAA) v kombinaci s jadernou gama-spektrometrií. Byly realizovány experimenty NAA s farmaceutickými tibetskými vzorky, výsledky byly prezentovány na konferenci ISRP-14 v Córdobě (Argentin) (říjen 2018) a byla připravena publikace s názvem „Neutron activation analysis of Tibetan traditional medicinal pills at the VR-1 training reactor“, která byla odeslána k posouzení do časopisu „Radiation Physics and Chemistry“. Recenzní řízení proběhlo úspěšně a ke dni 18.3.2019 byl uvedený článek přijat k publikování.

Po završení experimentů NAA s farmaceutickými tibetskými vzorky byly následně zahájené experimenty NAA s meteority na školním reaktoru VR-1 s cílem analyzovat a stanovit prvkové složení meteoritů ze Švédska, Ruska a České republiky. Zároveň byl připraven abstrakt s názvem „Neutron activation analysis of meteorites at the VR-1 training reactor“, který byl přihlášen a následně přijat na konferenci ICDA-3 (Lisabon, Portugalsko, květen 2019). V průběhu druhého monitorovacího období bude připravena i stejnojmenná publikace, která bude odeslána k posouzení do časopisu „Radiation Physics and Chemistry“.

Dále byly zpracovány přehledy, technické specifikace a další nezbytné podklady pro výběrové řízení na novou gama-spektrometrickou trasu s charakterizovaným polovodičovým HPGe detektorem, analyzátozem, stíněním a potřebným softwarovým vybavením.

V souladu s harmonogramem programu byly prováděny také experimenty využívající Mössbauerovy spektrometrie (MS) v transmisním uspořádání při pokojové teplotě. Jednalo se o měření na různých netradičních vzorcích s cílem posoudit diagnostický potenciál dané metody. Šlo především o vzorky nanočástic železa, o farmaceutické vzorky, dále vzorky slitin ozářené neutrony, ale i vzorky oxohydroxidů, které byly vystaveny účinkům houby *Aspergillus niger*. Výsledky výzkumu na posledně jmenovaných vzorcích jsou předmětem publikace Urík M., Polák F., Bujdoš M., Miglierini M. B., Milová-Žiaková B., Farkas B., Goneková Z., Vojtková H. and Matuš P.: Antimony leaching from antimony-bearing ferric oxyhydroxides by filamentous fungi and biotransformation of ferric substrate, *Sci. Tot. Environment* 664 (2019) 683-689. (DOI: 10.1016/j.scitotenv.2019.02.033), if = 4.610. Byla také zahájena měření MS při nízkých teplotách a s využitím techniky CEMS.

Pozornost byla věnována i přípravě podkladů pro výběrové řízení na komponenty Mössbauerovy spektrometrie.

V rámci skupiny zabývající se přístrojovým vybavením a vyhodnocováním naměřených dat z nedestruktivní rentgenové fluorescenční analýzy (XRF) byla realizována práce vedoucí ke stanovení charakteristik stávajícího vybavení za účelem tvorby výpočetních modelů založených na metodě Monte Carlo. Ty budou následně sloužit pro účely kalibrace při kvantitativním vyhodnocování dat v rentgenové fluorescenční analýze. Byly připravovány podklady pro publikaci dosažených výsledků. Konkrétně byl připravován článek o kvantitativní kalibraci přístroje pro konfokální XRF do časopisu *Radiation Protection and Dosimetry*, článek o parametrizaci přístroje pro mikro-XRF analýzu do časopisu *X-Ray Spectrometry* a byl publikován článek *Depth of layers in historical materials measurable by X-ray fluorescence analysis* v časopise *Radiation Physics and Chemistry*.

U ozařovacího kanálu Van de Graaffova urychlovače bylo započato s pracemi na úpravě iontovodu před terčovou komorou analytického zařízení, ale objevila se nutnost hradit plánované návrhářské, konstrukční a výrobní práce z investičních prostředků jako „technické zhodnocení aparatury“. Do ukončení změnového řízení byla tedy snížena intenzita postupu v této záležitosti a uvolněná kapacita věnována přípravám na další etapy modernizace HW a SW ovládání spektroskopie. Průběžně byly

prováděny analýzy vzorků a experimenty s ozařováním izolantů. Dále byla aktualizována webová stránka Laboratoře iontových svazků (<http://people.fjfi.cvut.cz/voltrjos/iontsvazky.html>) pro účely popularizace včetně uvedení odkazu na stránky Centra.

Část programu IRMA je zaměřena na **rozvoj difrakčních metodik** (neutronová a rentgenová difrakce) ve výzkumu vlastností perspektivních pokročilých materiálů. Ve shodě s plánem výzkumu a harmonogramem byly v první monitorovací etapě řešeny následující úkoly:

Transmisní experimenty porézními betonovými vzorky pomocí svazků tepelných neutronů. Cílem je získání experimentálních dat pro studium difuze vod, gadolinia nebo dysprosia v základní porézní matici rozdílných betonových vzorků. Vývoj kompozitů na bázi cementu vhodných pro imobilizaci radionuklidů je velmi důležitý pro bezpečné zadržování jaderného odpadu. To vyžaduje zejména podrobné znalosti o tom, jak jsou v těchto kompozitech transportovány radionuklidy. Experimentální data jsou získána nedestruktivním způsobem pomocí transmisí svazku tepelných neutronů zkoumanými vzorky a vedou k určení transportu gadolinia v suchém cementovém kompozitu. Jejich teoretická interpretace je založena na difuzním modelu. Dosažené výsledky jsou shrnuty v článku: I. Medved, L. Kalvoda, E. Vejmelková, S. Vratislav, R. Černý: "Transport of gadolinium in a cement composite" (To be presented on CESBP 2019 and published in Open Access MATEC Web of Conferences).

Další neutronografické experimenty byly provedeny za účelem analýzy kinetiky rozmrazování směsi písku a těžké vody. Byla použita kombinace dvou metodik neutronového rozptylu: neutronové radiografie a difrakční průletové metody. Procesy zmrazování a rozmrazování zemin byly zkoumány z různých důvodů, včetně mechanického poškození konstrukcí, těžby ropy a zemního plynu v chladných oblastech a uvolňování plynů z oblastí rozmrazování permafrostu způsobených nedávnými klimatickými změnami. Naměřená data umožnila provedení analýzy procesu tání ledu ve dvou směsích písku a těžké vody, které se lišily v hrubosti písku. Konzistentní výsledky byly získány oběma aplikovanými metodami demonstrujícími termodynamickou ekvivalenci dvou experimentálních uspořádání. Získané výsledky mohou přispět k pochopení kinetiky procesů tání ledu v půdách s různou zrnitostí a mohou být použity jako experimentální reference při ověřování teoretických modelů popisujících kinetiku tání ledu ve vlhkých půdách. Podrobnější studie plánované v budoucnu se zaměří na prostorovou distribuci a morfologii frakcí ledových a kapalných vod porézních směsí ledu a písku pomocí 3D neutronové tomografie. Dosažené výsledky jsou sestaveny do publikace: Ladislav Kalvoda, Sergey E. Kichanov, Monika Kučeráková, Evgeniy V. Lukin and Stanislav Vratislav, „Thawing in Sand/Water Mixtures Analysed by Neutron Radiography and Diffraction“.

V souladu s výzkumným plánem projektu byly v rentgenostrukturní a neutronografické laboratoři KIPL realizovány experimenty na kovových vzorcích typu Al-Si-Mg. Parametry mikrostrukturního uspořádání těchto materiálů jsou shrnuty do příspěvku, který na konferenci ECNS 2019 v Petrohradě (The European Conference on Neutron Scattering, St. Petersburg, Russia, June 30 - July 5, 2019) přednese členka týmu Monika Kučeráková.

Laboratoř neutronové difrakce spolupracuje již řadu let s Laboratoří neutronové fyziky SÚJV Dubna (Rusko). Spolupráce je rozvíjena i nadále v rámci řešení jednotlivých témat plánu výzkumu SÚJV Dubna: spolupráce probíhá v rámci tématu: 04 - 4 – 1121 - 2017/2022 „Investigation of condensed matter by modern neutron scattering methods“. V současné době se uskutečňuje spolupráce na výzkumu kinetiky směsí těžké vody a křemenného písku. Ke studiu je využívána kombinace metodik práškové neutronové difrakce, transmisních experimentů pomocí tepelných neutronů a pulsní neutronové difrakce na reaktoru IBR-2 v Dubně.



Aplikace jaderných metod (APPLICATIONS)

Koordinátor výzkumného programu - doc. Ing. Tomáš Trojek, Ph.D.

Podprogramy:

- A) Radiologická fyzika
- B) Životní prostředí a monitorování
- C) Kulturní dědictví

Na začátku řešení projektu v programu Aplikace byl vypracován harmonogram prací a byli určení pracovníci zodpovědní za plnění jednotlivých úkolů. Během následujících měsíců byl řešitelský tým doplněn o 5 členů, kteří obsadili všechny plánované pozice pro nové zaměstnance v tomto programu. V tomto období se podařilo publikovat 4 články v impaktovaných časopisech a další byly připravovány. Průběh prací v jednotlivých podprogramech programu Aplikace je shrnut níže.

Tým A - Radiologická fyzika

V rámci tohoto podprogramu byly zkoumány materiály a metody měření ionizujícího záření s ohledem na jejich využití v medicíně.

Byla vyvinuta nová metoda 3D dozimetrie externích klinických fotonových svazků pomocí radiochromického filmu. Je vhodná zejména k verifikaci ozařovacích plánů pacientů podstupujících techniku radioterapie s modulovanou intenzitou svazku, kde je žádoucí změřit dávkovou distribuci každého léčebného plánu před aplikací na pacienta. Žádná jiná 3D metoda, která by byla vhodná pro rutinní použití v klinické praxi, zatím neexistuje. Komerčně dostupná řešení neměří dávku ve 3D a gelová dozimetrie je příliš náročná pro užití v klinické praxi. Radiochromický film s jednoduchým plastovým fantomem je dostupný na každém pracovišti. Jako součást této metody byl vyvinut i vlastní software pro 2D a 3D gama analýzu pro kvantitativní porovnání dávkových distribucí. Byl zpracován článek do speciálního vydání časopisu Radiation Protection Dosimetry a ten byl přijatý k publikaci. Práce na vývoji této metody dále pokračuje, je potřeba porovnat její výsledky s jinými dostupnými metodami.

Z chemických dozimetrů byla věnována pozornost testování vlastností Frickeho gelového dozimetru s xylenolovou oranží. Pro účely zlepšení časové a teplotní stability dozimetru byly testovány různé druhy želatiny a dalších základních komponent. Dále byl systém zkoumán z hlediska chemických reakcí probíhajících mezi komponentami dozimetru v závislosti na změnách pH a bez ohledu na ozáření. Na konci tohoto období byla započatá optimalizace přístroje pro vyhodnocení gelových dozimetrů pomocí optické tomografie.

Při radioterapii štítné žlázy se v nukleární medicíně používají radiofarmaka obsahující ¹³¹I. Cílem této části studie je prozkoumat možnosti stanovení přesnějších absorbovaných dávek na základě kvantitativního měření aktivity v pozůstatcích štítné žlázy a/nebo lymfatických uzlin za použití pixelových detektorů pro měření v různých časech po aplikaci terapeutické dávky. Proběhla rešeršní práce v oblasti detektorů, které by bylo možné použít k sestavení speciálního detektoru pro měření aktivit v pozůstatcích štítné žlázy a/nebo lymfatických uzlin. V rámci rešeršní práce byly zkoumány i přístroje umožňující snímání malých zvířat s velmi dobrým rozlišením. Dále, byly nalezeny možnosti vyvinutí detektoru bez kolimačního systému. Použitím Comptonovy kamery by bylo možné kolimátory vynechat.



Tým B - Životní prostředí a monitorování

V oblasti využití bezpilotních leteckých prostředků (BLP) byly určeny požadavky na vybavení BLP s ohledem na očekávané podmínky při měření (meteorologické podmínky, uvážení EM rušení, atd.). Bylo zváženo využití doplňujících komponent pro bezpečnost zařízení, zejména možnosti využití padáku pro měření v relativně nízkých výškách. Byly uváženy možnosti zakoupení komerčně dostupného zařízení i možnosti využití modulárních systémů. S ohledem na zamýšlené využití BLP pouze jako nosiče samotného zařízení (detekčního systému), na kterém bude probíhat výzkum, se přiklonilo k využití hotového komerčně dostupného zařízení BLP. Byla provedena základní rešerše současné komerční nabídky a kontaktován výrobce detekčních systémů pro využití s BLP pro získání informací o základních technických parametrech systému, což je zejména velikost detekčních krystalů, hmotnost detekční sestavy (včetně GPS lokátoru, výškoměru, atd.) V návaznosti na získané informace byla stanovena minimální nosnost BLP 5,5 kg. Byla provedena rešerše platné legislativy pro využití BLP v hmotnostní kategorii 7 – 25 kg pro výzkumnou a experimentální činnost. Na základě leteckého předpisu L2 pro pravidla létání a zejména podle jeho doplňku X byl sestaven přehled požadavků na vybavení BLP (vybavení „failsafe systémem“) a proškolení obsluhy BLP, nezbytné pro získání povolení k létání a k provádění leteckých prací. Na základě simulačních výpočtů (metoda Monte Carlo) byla odhadnuta optimální velikost detekčních krystalů s přihlédnutím k nosnosti BLP a požadavkům na kvalitu měřených dat. Byly napočteny modelové odezvy detektorů NaI(Tl), BGO a GAGG uvažovaných rozměrů pro interval energií pro monitorování v životním prostředí (tj. do 3 MeV) pro účely porovnání jejich vlastností a optimalizace výběru a použitelnosti pro letecký spektrometr (zavěšený pod BLP).

V souvislosti s interpretací testovacích dat z letecké spektrometrie gama byly upraveny programy pro dekonvoluci spekter s ohledem na specifika spektrometrie s využitím BLP, kdy jsou s ohledem na jejich nosnost limitovány rozměry (resp. hmotnost) detektorů, což vede ke zhoršené statistice měřených spekter. V návaznosti na tuto problematiku byly testovány potenciální metody zlepšení výsledků dekonvolučního postupu v případě zpracování spekter se špatnou statistikou. Byly provedeny první testy navržené metody získání výsledku zprůměrováním zpracování velkého počtu spekter, odvozených z primárního změřeného spektra náhodnými statistickými perturbacemi jednotlivých kanálů a byla připravena první verze programu pro zpracování spekter touto metodou. V další etapě se předpokládá vypracování zdokonaleného algoritmu perturbace jednotlivých kanálů experimentálních spekter zavedením parametrů reálného rozlišení konkrétního detektoru.

V oblasti moderních monitorovacích systémů byla realizována základní měření vybraných charakteristik (zejména energetické rozlišení a úhlová závislost) scintilačních detekčních sond (NaI(Tl), LaBr₃(Ce), CeBr₃). Dále bylo započato s rešerší moderních měřicích systémů a jejich uplatnění ve stanovování radionuklidů při monitorování životního prostředí – zejména detektorů CdTe a CZT. Současně byly vytipovány oblasti možnosti zneužití ionizujícího záření (resp. radionuklidů) a bylo započato s rešerší detekčních systémů potenciálně vhodných pro jejich detekci a identifikaci. V rámci laboratorní gama spektrometrie byla provedena inovace softwarového vybavení laboratoře, upgrade současně používaného modelu HPGe detektoru a metrologické ověření tohoto detektoru.

Během prvních měsíců řešení projektu CAAS proběhla i kontrola kontinuálních monitorů radonu umístěných v Mladečských a Bozkovských jeskyních, bylo vyměněno sušidlo a z interní paměti přístrojů stažena data ke zpracování.



V rámci zpracování časových řad naměřených dat proběhla příprava SW kódu pro eliminaci sezónních složek a identifikaci anomálií. Z důvodu budoucího/plánovaného nákupu sítě monitorů radonu byla kontaktována firma Tesla a.s. – jediný výrobce kontinuálních monitorů radonu na bázi diod – a diskutována možnost využití detektorů v podmínkách vysoké vlhkosti (je připravováno uspořádání detektorů pro měření v extrémních klimatických podmínkách).

Během monitorovacího období proběhlo dokončení zpracování dat a jejich grafické prezentace pro připravované články z oblasti havarijního monitorování a leteckého monitorování a spektrometrie gama s využitím BLP a byly dokončeny verze článků pro recenzní řízení. Konkrétně se jedná o články s tituly Simulation of Dose Distribution in Vicinity of Cloud of Contaminated Air Leakage from Severe NPP Accident a The Use of Deconvolution Technique for the Analysis of Gamma Spectrometry Data from Field Monitoring using Unmanned Aerial Vehicles. Tyto články je plánováno publikovat v časopise Radiation Protection Dosimetry.

V rámci řešení projektu byla rovněž připravena metoda recalibrace a zpracování spektrometrických dat. Touto metodou byla následně vyhodnocena spektra z in-situ gama spektrometrie z terénních měření a měření na vodní hladině (měření pro kalibraci odezvy spektrometrů na kosmické záření) a porovnány výsledky celkem 4 spektrometrických systémů a jednoho monitoru záření gama.

V druhé polovině monitorovacího období byla také započata rešerše a příprava technické specifikace pro zakoupení výpočetního clusteru. Tento bude v budoucnu sloužit pracovníkům podprogramu pro výkonově a paměťově náročné výpočty transportu záření látkou založené na metodě Monte Carlo.

Tým C - Kulturní dědictví

V podprogramu Kulturní dědictví byly zahájeny práce na všech 4 dílčích úkolech, které se soustředí na průzkum maleb, historických předmětů vyrobených z neželezných kovů, předmětů obsahujících toxické látky a v neposlední řadě také na měření vzorků skla, emailů, glazur a kovů s povrchovou úpravou.

Prvková analýza původních historických artefaktů z neželezných kovů zahrnovala měření autentických archeologických nálezů z depozitáře expozitury Archeologického ústavu Akademie věd České republiky v Dolních Dunajovicích pomocí rentgenové fluorescenční analýzy. Tato měření byla zaměřena na kovové předměty zdobené technikami emailu z doby římské z významné lokality Mušov-Burgstall. Kromě průzkumu samotného kovu byly zkoumány také sklovité části předmětů a bylo řešeno, jak se tyto dvě složky vzájemně chemicky ovlivňují.

Instrumentální analytické metody mohou sloužit k identifikaci některých toxických látek v historických předmětech, aniž je nutné odebírat vzorky, které by se musely následně zdlouhavě analyzovat v chemické laboratoři. Pomocí metod rentgenové fluorescenční analýzy bylo identifikováno několik zdraví nebezpečných předmětů ze sbírek Technického muzea v Brně a Moravského zemského muzea v Brně. V Moravském zemském muzeu v Brně byly takové předměty zachyceny především v numismatických sbírkách. Jednalo se o středověké mince postříbřené technikou amalgámu. Koncentrace rtuti na povrchu těchto mincí je vysoká, takže při manipulaci během čištění jsou tyto předměty zdraví nebezpečné. V archeologických sbírkách byly zachyceny arzenové bronzy ze starší doby bronzové, jejichž čištění rovněž představuje zdravotní riziko.

Práce na problematice studia skla, emailů, glazur a kovů s povrchovou úpravou byla zahájena studiem historických receptur emailů a glazur. Na jejich základě budou připraveny vzorky, které



budou sloužit jako referenční materiály pro rentgenovou fluorescenční analýzu historických materiálů.

V rámci studia historických maleb se výzkum zaměřil na analýzu dat a jejich interpretaci z již dříve provedených měření pigmentů použitých k výzdobě erbovního sálu na hradě Lauf u Norimberku. Dále pak bylo provedeno měření polychromií portrétních bust v triforiu katedrály svatého Víta na Pražském hradě.

V průběhu prvního monitorovacího období byl revidován plán nákupu přístrojového vybavení. Po dohodě s řešitelským týmem programu IRMA bylo dohodnuto, že bude pořízena moderní varianta přístroje X-ray color camera, která má výrazně lepší parametry než dříve plánované zařízení a bude sloužit potřebám obou programů (IRMA a Aplikace).

Výsledky výzkumné činnosti podprogramu Kulturní dědictví byly publikovány ve 3 článcích v impaktovaném časopise Radiation Physics and Chemistry a další jsou podány nebo připravovány.

Projektové shromáždění

21. 2. 2019 bylo zorganizováno první projektové shromáždění. Zúčastnili se vědečtí pracovníci, kteří jsou součástí projektu. Tato velká událost představovala unikátní možnost pro všechny vědecké pracovníky, aby se setkali se svými kolegy z ostatních institucí/fakult/kateder, diskutovali s nimi o svých

vědeckých zájmech a vytvořili nové vazby mezi výzkumnými programy/podprogramy s cílem posílení potenciálních synergií, které se objeví v průběhu implementace projektu. Projektové shromáždění zahrnovalo obecnou část věnovanou prezentaci zahájené a plánů projektu Centra pokročilých aplikovaných přírodních věd.

Program:

- prof. Ing. Igor Jex, DrSc. – úvodní slovo ředitele projektu
- prof. Ing. Zbyněk Škvor, CSc. – čestný host
- Mgr. Jakub Heller – administrativní tvůrce projektu
- Ing. Michaela Schwarzová – administrativní manažer projektu
- Mgr. Alica Weiszová – ekonomický manažer
- Jan Kadeřábek – prezentace www stránek

