

# **Struktura, interakce a modelování systémů na molekulární úrovni**

## **Structure, interactions and modelling of systems at the molecular level**

Webová stránka:

<http://prf.osu.cz/kfy/20152/biofyzika-biochemie-a-ekofyziologie-fotosyntezy/>

<http://prf.osu.cz/kfy/20155/chemicka-fyzika/>

<http://kch.osu.cz/index.php/research/research-groups/>.

### **Anotace**

Česká anotace (max 250 slov)

Výzkumný směr vychází z tradičních i nových oblastí výzkumu Kateder fyziky a chemie Přírodovědecké fakulty Ostravské univerzity, u kterých v posledních letech došlo k výraznému pokroku (zapojení excelentních i velmi perspektivních mladých vědců). Výzkum je zaměřen na tři dílčí oblasti: 1, Variabilita složení a strukturně-funkčních charakteristik tylakoidních membrán vyšších rostlin; 2, Výpočetní chemická fyzika; 3, Povrchově reaktivní uhlíkaté materiály. Společným cílem výzkumu, zahrnujícího biofyzikální a fyzikálně chemické přístupy a moderní metody výpočetní chemické fyziky, je přispět k pochopení molekulárních interakcí, které určují souvislost mezi strukturou a funkcí studovaných systémů (tj. lipid-proteinové interakce v tylakoidních membránách – oblast 1, interakce mezi adsorbovanou částicí a povrchem adsorbentu – oblast 3). Výsledky výzkumu přinesou zásadní pokrok v jednotlivých oblastech výzkumu: 1, poznání podstaty odolnosti fotosyntetického aparátu vyšších rostlin vůči abiotickým stresům souvisejícím s globální klimatickou změnou; 2, fundamentální pochopení vybraných moderních referenčních výpočetních metod a s jejich pomocí vysvětlení fyzikálně-chemických vlastností studovaných (technologicky důležitých) materiálů a reakcí 3, cílené syntézy speciálních uhlíkatých materiálů s definovanou povrchovou aktivitou založenou na synergickém působení adsorpce a povrchové chemické reakce pro různé aplikace (dekontaminace vod a ovzduší, fotoaktivní materiály, elektrody palivových článků, aktivní hmoty superkondenzátorů apod.). Především v oblasti 3 bude pozornost zaměřena i na výstupy aplikovaného výzkumu (patenty).

Anglická anotace (max 250 slov)

The research is based on both traditional and new research areas at Departments of Physics and Chemistry that underwent significant progress during the last years (both excellent and promising young researchers were engaged). The proposed research focuses on three specific areas of research: 1, Variability of composition and structural-functional characteristics of thylakoid membranes of higher plants; 2, Computational chemical physics; 3, Surface-reactive carbonaceous materials. The common objective of the research, incorporating biophysical, physico-chemical approaches and advanced computational methods of chemical physics, is to contribute to the understanding of the molecular interactions that determine the relationship between structure and function of the studied systems (e.g. lipid-protein interactions in thylakoid membranes – research area 1; interaction between the adsorbed species and the surface of the adsorbent - area 3). The results will bring substantial progress in the individual areas of research: 1, elucidation of background for the resistance of photosynthetic apparatus in higher plants against abiotic stresses associated with global climate change; 2, fundamental understanding of the selected advanced reference computational methods which will help to explain the physico-chemical properties of studied (technologically important) materials and reactions; 3, targeted synthesis of special carbonaceous materials with defined surface activity based on the synergistic effect of adsorption and surface chemical reactions for various applications (water and air decontamination, photoactive materials etc.). In addition, particularly research area 3 will bring outputs of the applied research.

## **Dílčí oblasti výzkumu:**

### **1, Variabilita složení a strukturně-funkčních charakteristik tylakoidních membrán vyšších rostlin**

**Skupina Biofyziky KFY (aktuální složení) :** G. Garab, V. Špunda, M. Štroch, V. Karlický, I. Kurasová, M. Navrátil, J. Nezval, D. Vrábl; **doktorandi:** Z. Materová, J. Semer, M. Opálková)

Výzkum se zabývá vlivem významných faktorů vnějšího prostředí (intenzita a spektrální složení radiace, teplota vzduchu, koncentrace CO<sub>2</sub>, další faktory změn klimatu) na asimilační aparát vyšších rostlin, od mechanismů regulace využití dopadající radiace až po odezvu fotosyntetické aktivity na úrovni listu a rostliny. Aktuálně je výzkum soustředěn do dvou prioritních témat: I, Vliv interakcí specifických lipidů a proteinů tylakoidních membrán na strukturně-funkční charakteristiky tylakoidních membrán v souvislosti s odolností vůči oxidativnímu stresu; II, Vliv intenzity a spektrálního složení radiace na asimilační aparát rostlin a fyziologickou úlohu fenolických látek. Experimentální zázemí výzkumu je založeno především na použití a rozvoji a) biofyzikálních metod optické spektroskopie ke studiu struktury a funkčního stavu asimilačního aparátu a b) biochemických metod analýzy složek asimilačního aparátu (fotosyntetické pigmenty, sekundární metabolity, pigment-proteinové komplexy tylakoidních membrán a další).

### **2, Výpočetní chemická fyzika**

**Skupina Chemické fyziky KFY (aktuální složení):** F. Karlický, M. Dubecký; **doktorand:** M. Kolos – vzhledem ke kvalitě výzkumu je prioritou rozšíření skupiny v následujících letech

Skupina chemické fyziky se zabývá teorií elektronové struktury a počítačovým modelováním molekulárních komplexů a materiálů na atomové škále. Kromě aplikace tradičních metod (kvantová chemie, funkcionál hustoty elektronů) je kladen důraz na výzkum a vývoj alternativních mnohočásticových stochastických metod (kvantové Monte Carlo) a jejich použití na přesný popis elektronové struktury a plně kvantový popis pohybu jader. Výpočetní metody jsou aplikovány na molekuly, klastry, pevné látky, povrchy a nanomateriály se zaměřením na predikci jejich strukturních, elektronických, optických, adsorpčních vlastností a jejich interakcí. Úspěšně jsou popisovány náročné systémy a jevy jako přechodné kovy, jejich oxidy, nekovalentní interakce a fyzisorpce, jaderné delokalizační efekty silně kvantových systémů a excitonické efekty u nanostruktur.

### **3, Povrchově aktivní uhlíkaté materiály**

**Skupina KCH (aktuální složení):** V. Slovák, J. Parmentier, P. Bulavová, T. Zelenka; **doktorandi:** G. Hotová, E. Kinnertová, M. Palkovská, J. Štefelová.

Výzkum skupiny je orientován na syntézu nových typů porézních uhlíkatých materiálů pro aplikace v oblasti adsorpce (v kapalném i plynném prostředí), katalýzy a fotokatalýzy, elektrochemie, separace, a dalších. Mezi základní řešené problémy patří hledání metod pro řízení porozity uhlíkatých gelů založených na organických nebo přírodních prekurzorech (ovlivňování procesu gelace, využití soft-templating), syntéza vícevrstvých uhlíkatých materiálů s hierarchickou porozitou (kombinované mikro-mezo-makroporézní systémy) a funkcionalizace uhlíkaté matrice heteroatomy (dusíkem, kyslíkem nebo sírou dopované materiály pro vázání těžkých kovů, dopování fotoaktivními centry pro fotooxidaci, dopování stříbrnými ionty pro antibakteriální materiály). Neoddělitelnou součástí výzkumu je studium interakcí různých molekul s povrchem uhlíkatých materiálů, objasnění mechanismu jejich sorpce, kinetiky jejich transportu v porézních systémech a vývoj technik pro charakterizaci porézních uhlíkatých materiálů.

## **Vazba na doktorské studium:**

Zapojení studentů doktorského studia dvou oborů: Biofyzika a Analytická chemie heterogenních systémů. V současné době se na řešení podílí 8 doktorandů a 3 absolventi těchto oborů.

## **Akreditace habilitačních a profesorských řízení: ne**

Plánujeme podat návrh akreditace habilitačních řízení v letech 2019-2020

---

## **Struktura vědeckého týmu:**

**Garant HSV: Doc. RNDr. Vladimír Špunda, CSc,**

### **Vedoucí týmů – klíčoví členové týmů**

#### **Dílčí oblast I:**

Dr. Győző GARAB, D.Sc. – scientific supervisor

Doc. RNDr. Vladimír Špunda, CSc. – senior researcher

Mgr. Michal Štroch, Ph.D. – junior researcher

#### **Dílčí oblast II:**

Mgr. František Karlický, Ph.D. – senior researcher

Ing. Matúš Dubecký, Ph.D. – junior researcher

#### **Dílčí oblast III:**

Doc. Julien Parmentier, Ph.D. – senior researcher

Doc. RNDr. Václav Slovák, Ph.D. – senior researcher

### **Další členové týmu a postdoktorandi**

#### **Dílčí oblast I:**

Mgr. Václav Karlický, Ph.D. - postdoktorand, Mgr. Irena Kurasová, Ph.D. – junior researcher, Mgr.

Martin Navrátil, Ph.D., Mgr. Jakub Nezval, Ph.D. – postdoktorand, Mgr. Daniel Vrábl, Ph.D. – junior researcher

#### **Dílčí oblast III:**

Mgr. Petra Bulavová, Ph.D. - postdoktorand, Mgr. Tomáš Zelenka, Ph.D. - postdoktorand

### **Studenti doktorského studia:**

#### **Dílčí oblast I:**

Mgr. Zuzana Materová, Mgr. Jan Semer, Mgr. Marie Opálková

#### **Dílčí oblast II:**

Mgr. Miroslav Kolos

#### **Dílčí oblast III:**

Mgr. Eva Kinnertová, Mgr. Gabriela Hotová, Mgr. Jana Štefelová, Mgr. Monika Palkovská

---

## **Vědecké výstupy:**

### **Výjimečné excelentní výsledky**

Oblast 1

- **Karlický V, Kurasová I, Ptáčková B, Večeřová K, Urban O, Špunda V** (2016) Enhanced thermal stability of the thylakoid membranes from spruce. A comparison with selected angiosperms. *Photosynth Res* 130: 357-371 (IF 4.122)

- zjištění atypického složení lipidů (a zastoupení mastných kyselin) tylakoidních membrán smrku ztepilého ve srovnání s typickými vyššími rostlinami a jejich vliv na strukturně-funkční stav tylakoidních membrán; tento nový poznatek byl impulsem k zintenzivnění spolupráce s dr. Garabem a skupinou dr. Lambreva (BRC HAS Szeged) a nastartoval nové zaměření výzkumu na studium významu interakcí lipidů a proteinů pro determinaci strukturně-funkční stav tylakoidů; V. Karlický byl oceněn Cenou děkana PŘF OU za 2016.

Oblast 2

- Zbořil R., **Karlický F.**, Bourlinos A.B., Steriotis T.A., Stubos A.K., Georgakilas V., Šafářová K., Jančík D., Trapalis C., Otyepka M.: Graphene fluoride: a stable stoichiometric graphene derivative and its chemical conversion to graphene. *Small* 6, 2885-2891, 2010 (IF=8.315, times cited 167)
- objev fluorografenu, bylo přijato do II. pilíře.

#### Oblast 3

- **Hotová, G.; Slovák, V.** Determination of the Surface Oxidation Degree of the Carbonaceous Materials by Quantitative TG-MS Analysis. *ANAL CHEM.* **2017**, 89, 1710-1715 (IF 5.886)
- stejným týmem dříve vyvinutá metodologie kvantitativního využití TG-MS k určení složení plynů uvolňovaných při rozkladu uhlíkatých látek byla zde modifikována pro stanovení stupně povrchové oxidace uhlíkatých materiálů. Práce popisuje dosud nepopsanou a nevyužitou možnost přímého stanovení množství povrchového kyslíku bez nutnosti komplikované kalibrace.

### **Významné publikační výstupy (max. 5)**

#### Monografie:

- 1, **Garab G** (editor) (1998) *Photosynthesis: Mechanisms and Effects*. Kluwer Academic Publishers. Volume I-V, 4396 p. (ISBN: 978-94-010-5755-4)
- 2, Demmig-Adams B, **Garab G**, Adams III W, Govindjee (editors) (2014) *Non-Photochemical Quenching and Energy Dissipation in Plants, Algae and Cyanobacteria*. Berlin; Heidelberg; New York: Springer, (Series: *Advances in Photosynthesis and Respiration*; Vol 40.), 649 p. (ISBN:978-94-017-9031-4)

#### Články v časopisech:

- 1, Mustárdy L, **Garab G** (2003) Granum revisited. A three-dimensional model—where things fall into place. *Trends Plant Sci* 8: 117-122. IF<sub>2003</sub>: 13.405, WOS – počet citací bez autocitací : 96)
- 2, Urban O, Janouš D, Acosta M, Czerný R, Marková I, **Navrátil M**, Pavelka M, Pokorný R, Šprtová M, Zhang R, **Špunda V**, Grace J, Marek MV (2007) Ecophysiological controls over the net ecosystem exchange of mountain spruce stand. Comparison of the response in direct vs. diffuse solar radiation. *Global Change Biology* 13: 157–168. (IF<sub>2007</sub>: 4,786, WOS – počet citací bez autocitací: 75)
- 3, **Dubecký M.**, Mitas L., Jurečka P. Noncovalent Interactions by Quantum Monte Carlo. *Chem. Rev.*, 2016, 116 (9), pp 5188-5215 (IF=37.369, WOS – počet citací 10i)
- 4, Lazar P, **Karlický F**, Jurečka P, Kocman M, Otyepková E, Šafářová K, Otyepka M: Adsorption of Small Organic Molecules on Graphene. *J. Am. Chem. Soc.* 135(16), 6372-6377, **2013** (IF=13.038, WOS – počet citací: 122)
- 5, Vix-Guterl C, Frackowiak E, Jurewicz K, Friebe M, **Parmentier J**, Beguin F (2005) Electrochemical energy storage in ordered porous carbon materials. *Carbon* 43: 1293-1302. IF<sub>2005</sub>: 3,419, WOS – počet citací bez autocitací: 308.

### **Významné aplikované výsledky**

Patenty (vybrané patenty G.GARABA a J. Parmentiera):

- 1, Název: Differential polarization measuring extension unit for a laser-scanning microscope

Date of announcement: 2008.09.26; Date of publication: 2013.05.28;

Case number: US 12/679,888

Inventors: (50%) **Dr. Győző Garab**; (50%) Dr. István Pomozi

- 2, Název: Laser-scanning microscope with a differential polarization measuring extension unit

Date of announcement: 2008.09.26; Date of publication: 2013.11.06

Case number: EP20080806829

Inventors: (50%) **Dr. Győző Garab**; (50%) Dr. István Pomozi

- 3, Název: Process for separation of CO<sub>2</sub> by pressure-modulated adsorption on a porous carbon solid

Date of announcement: 2009.06.22; Date of publication: 13 jan. 2011.01.13  
Case number: US 12/820,412, CA2707049A1, EP2272581A1, FRA0903009.  
Inventors: Joël Patarin, Claire Ducrot-Boisgontier, Elsa Jolimaitre, **Julien Parmentier**, Gerhard Pirngruber

4, **Název: Method for manufacturing a ceramic composite material**

Date of announcement: 11 Aug. 1997; Date of publication: 26 June 2001  
Case number: WO1999007653 A1, CA2268019A1, CA2268019C, DE69708682D1, DE69708682T2, EP0946458A1, EP0946458B1, US6251317.  
Inventors: Robert Lundberg, Magnus Holmquist, Anthony G. Razzell, Ludovic Molliex, Olivier Sudre, Michel Parlier, Fabrice Rossignol, **Julien Parmentier**.

Hospodářské smlouvy:

1, **Smlouva o spolupráci** mezi **Lightdrop, s.r.o.** a Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta  
Předmět smlouvy: Předmětem této smlouvy je spolupráce smluvních stran a poskytnutí expertní služby za účelem zajištění realizace projektu v rámci dotačního programu Podpora vědy a výzkumu v Moravskoslezském kraji 2016 s názvem „Inteligentní osvětlovací systém pro efektivní kultivaci rostlin“

Doba řešení: 1. 9. 2016 – 31. 8. 2017

Cena plnění: 270 000 Kč

Zodpovědná osoba za OU: Vladimír Špunda

**Významné granty (CEP, mezinárodní) – za posledních 10 let**

**1, Poskytovatel:** Grantová agentura České republiky

**Název projektu:** Aklimace fotosyntetického aparátu smrku ztepilého vůči změnám dopadající sluneční radiace. 522/07/0759

**Doba řešení:** 1.1. 2007 – 31.12. 2009

Celková dotace: 3 131 000 Kč, z toho pro OU 2 234 000 Kč

**Řešitel:** Vladimír Špunda – OU / Spoluřešitel: Miroslava Šprtová - ÚSBE AV ČR

**2, Poskytovatel:** Grantová agentura České republiky

**Název projektu:** Nezářivá disipace excitační energie ve vztahu k organizaci pigment-proteinových komplexů ve fotosyntetickém aparátu vyšších rostlin. GA ČR 522/07/P246

**Doba řešení:** 1.1. 2007 – 31.12. 2009

Celková dotace: 1 194 000 Kč, z toho pro OU 1 194 000 Kč

**Řešitel:** Michal Štroch – OU

**3, Poskytovatel:** Grantová agentura České republiky

**Název projektu:** Dynamika a variabilita epidermálního UV stínění a ochranné funkce karotenoidů u vyšších rostlin v důsledku změn radiačního prostředí. GA ČR 522/09/0468

**Doba řešení :** 1.1. 2009 – 31.12. 2012

Celková dotace: 5.097.000 Kč, z toho pro OU 3.498.000 Kč

**Řešitel:** Vladimír Špunda - OU / Spoluřešitel: Otmar Urban – ÚVGZ AV ČR

**4, Poskytovatel:** Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy

**Název projektu:** Vliv radiačního režimu v městských oblastech na fotosyntézu vybraných druhů rostlin. COST LD14005

**Doba řešení:** 1.4. 2014 – 31.12. 2016

**Celková dotace:** 2.094.000 Kč, z toho pro OU 2.094.000 Kč

**Řešitel:** Vladimír Špunda

**5, Poskytovatel:** Grantová agentura České republiky

**Název projektu:** Vliv teploty a fotosynteticky aktivní radiace na dynamiku regulace funkce fotosystému II vyšších rostlin. GAČR 13-28093S

**Doba řešení:** 1.1. 2013 – 31.12. 2016

**Celková dotace:** 12.513.000 Kč, z toho pro OU 4.166.000 Kč

**Řešitel:** Vladimír Špunda – OU / Spoluřešitelé: Roman Kouřil – UPOL, Otmar Urban – ÚVGZ AV ČR

**6, Poskytovatel:** Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy

**Název projektu:** Institut environmentálních technologií. MŠMT OP VaVpl CZ.1.05/2.1.00/03.0100

**Doba řešení:** 1.11. 2011 – 31.12. 2013

**Částka pro OU (spolupříjemce, příjemce IET VŠB-TUO):** 65.958.700 Kč

**Spoluřešitel:** Boleslav Taraba (Vladimír Špunda a Václav Slovák: Senior Researcher - Člen týmu)

**7, Poskytovatel:** Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy

**Název projektu:** Teoretické aspekty energetického zpracování odpadů a ochrany prostředí před negativními dopady. MŠMT NPU I LO1208

**Doba řešení:** 1.1. 2014 – 31.12. 2018

**Částka pro OU (spolupříjemce, příjemce IET VŠB-TUO):** 16.299.000 Kč

**Spoluřešitel:** Boleslav Taraba (Vladimír Špunda a Václav Slovák: Senior Researcher - Člen týmu)

---

## ***Ohlasy vědecké obce a společnosti:***

### ***Významná ocenění klíčových členů týmu***

- G. Garab : 1994 – J. Ernst award - Hungarian Biophysical Society; 2001 -Straub Medal - Biological Research Center; 2009 - Knight of the International Order of Merit of Inventors - the International Federation of Inventors' Associations, IFIA; 2014 - Farkas Gábor Medal - Hungarian Society of Plant Biologists.
- F. Karlický: Čestné uznání České fyzikální společnosti v soutěži vědeckých prací mladých fyziků o cenu Milana Odehnala - 2008; Cena děkana PŘF UPOL za vynikající publikace - 2010, 2011, 2012, 2013; Nejvyšší ocenění v soutěži mladých pracovníků vědy a výzkumu vyhlášené hejtmanem Moravskoslezského kraje (1. místo – 6. 4. 2010, Opava; 1. místo – 17. 3. 2009, Ostrava; 2. místo – 12. 4. 2011, Ostrava; 3. místo – 13. 2. 2008, Ostrava).
- M. Dubecký: Prestižní stipendium A\*STAR SINGA v Singapuru - 2008 (13 měsíců, v skupině prof. Haibina Su na Nanyang Technological University, Singapur); Cena děkana Fakulty elektrotechniky a informatiky STU v Bratislavě – 2005, 2008.

### ***Členství v mezinárodních redakčních radách časopisů***

- J Photochem Photobiol B: Biol (G. Garab - Editorial Board Member)
- Photosynthetica (G. Garab – Assoc. Editor);

### ***Členství ve vědeckých společnostech (uvedeny jsou pouze významnější funkce)***

- V. Slovák – člen Hlavního výboru a Předsednictva České společnosti chemické (od 2005 dosud)
- V. Špunda - člen odborných komisí Grantové agentury České republiky : člen podborové komise 522, Rostlinolékařství, fyziologie rostlin (2003-2008, v letech 2006-2007 předseda), člen

oborové komise 5 Sekce zemědělských věd (2006-2007), člen panelu P501 (2011-2015, 2016-doposud), člen OK 5 (2011-2012)

- G. Garab: Maďarská biofyzikální společnost (Hungarian Biophysical Society) – 1994 -2002 - vice president, 2008-2015 – generální tajemník

---

## **Ekonomické zajištění:**

### **Popis stávajícího financování:**

Financování výzkumu v oblasti 1 je dlouhodobě zajišťováno převážně z externích zdrojů (viz. Seznam významných grantů, v letech 2010-2016 se jednalo o cca 1-2 mil. Kč ročně: část mzdových prostředků, převážná část provozních nákladů). Z rozpočtu Katedry fyziky a z prostředků na „institucionální výzkum“ (cca 1,2 mil Kč) jsou hrazeny především mzdové prostředky, z prostředků Studentské grantové soutěže pak výzkum doktorandů. Vzhledem k omezenému rozpočtu katedry fyziky (z důvodu malého počtu studentů), je i dočasný výpadek financování z grantů VaV výrazným problémem pro kontinuální zajištění prostředků na výzkumný tým a jeho provoz.

Financování výzkumu v oblasti 3 je realizováno z prostředků Katedry chemie: mzdové prostředky a základní provoz jsou financovány z dotačních zdrojů, členům týmu je k dispozici proporční část financí za „institucionální výzkum“ (v roce 2017 se jedná o částku 308 tis. Kč), část výzkumu doktorských studentů je financována prostřednictvím Studentské grantové soutěže, náklady na mobility, tj. návštěvy zahraničních pracovišť jsou většinou podpořeny z příslušných mobilních projektů. Stávající stav financování zajišťuje běžný provoz, nicméně na rozvoj v oblasti investic a lidských zdrojů je nezbytné zajistit další, externí zdroje financí.

Rozvoj výzkumu v oblasti 2 byl umožněn díky IRP projektům Postdoc, které umožnily přijetí Dr. Dubeckého (Název projektu: Vývoj metod kvantového Monte Carla) a Dr. Karlického (Název projektu: Výpočetní studie nanosystémů) na KFY od 1.9. 2015 na částečný úvazek 0,5. Od 1. 3. 2016 pak u obou dvou mladých vysoce perspektivních vědců došlo k navýšení úvazku na 1,0. Z projektu IRP je hrazena převážná část mzdových nákladů, z rozpočtu KFY (prostředky na „institucionální výzkum“) pak byla hrazena spoluúčast katedry a zbývající část úvazku dr. Karlického. Provozní náklady jsou v omezené výši hrazeny z rozpočtu KFY, v roce 2016 byly náklady na pracovní cesty a pozvané vědecké pracovníky hrazeny z projektu SMO „Posílení mezinárodního rozměru vědeckých aktivit na PŘF OU“. Vzhledem k velmi vysoké kvalitě realizovaného výzkumu, je nutno pro rozvoj oblasti (po personální i materiální stránce) nutno zajistit externí zdroje.

Významný přínos pro rozvoj výzkumu v oblasti 1 a 3 má projekt MSK „Posilování mezinárodní spolupráce v oblasti vědy, výzkumu a vzdělávání; subprojekt: Zapojení zahraničních pracovníků do výzkumu struktury a molekulárních interakcí vybraných biologických a chemických systémů“ (podpora 0,5 úvazku G. Garaba a 0,25 úvazku J. Parmentiera od 1.10. 2016 do 31.12. 2017). Přijetí obou excelentních pracovníků přineslo nové myšlenkové proudy do stávajících výzkumných směrů, přístup k zařízení velkých infrastruktur VaV a zvýšení konkurenceschopnosti v mezinárodních programech VaV. Zájem KFY, KCH a obou zmíněných vědců o pokračování intenzivní spolupráce dokládá skutečnost, že oba dva pracovníci podali návrh projektu do soutěže GA ČR, jakožto zaměstnanci PŘF OU (viz. Popis mechanismu udržitelnosti).

V neposlední řadě byl od roku 2011 výzkum v oblasti 1 a 3 podpořen projektem VaVpl CZ.1.05/2.1.00/03.0100 „Institut environmentálních technologií“ a návazným projektem v rámci národního programu udržitelnosti (především bylo výrazně modernizováno a rozšířeno vybavení laboratoří pro výzkum v obou oblastech, rovněž byl pořízen malý výpočetní klastř pro účely výzkumu v oblasti 2).

### **Popis mechanismu udržitelnosti:**

Jednotlivé oblasti výzkumu jsou částečně financovány z prostředků katedry fyziky a chemie. Vzhledem k setrvačnosti náběhu prostředků za „publikační body“ je po dobu následujících 4-5 let udržení a především rozvoj týmu závislý na externích (grantových) prostředcích. Protože je rozpočet

obou kateder poměrně nízký (především katedry fyziky, z důvodu malého počtu studentů), představuje výpadek financování z grantů VaV, výrazné problémy ve financování výzkumu a potažmo pak ohrožení existence výzkumných týmů.

Z tohoto důvodu je velké úsilí věnováno samostatným návrhům projektů členů řešitelského kolektivu, případně zapojení do centrálních projektů univerzity:

a, V roce 2016 byl podán návrh projektu „Struktura, Interakce, Modelování - Multidisciplinární excelentní výzkum“ (vedoucí výzkumného programu Vladimír Špunda) do OP VVV PO1 Excelentní výzkum (výsledky 1. kola : 68. pořadí z 118 úspěšných žádostí, 124 bodů ze 150, celková požadovaná dotace pro OU : cca 115.000.000). Přestože je nereálné, že návrh projektu bude v rámci aktuální výzvy financován, byl podán návrh do 2. kola hodnocení (potenciální možnost zúčastnit se s přepracovaným návrhem případně nové výzvy).

b, V roce 2017 bylo dále podáno členy řešitelského kolektivu 7 návrhů projektů do soutěže GA ČR ( 5x je člen řešitelského kolektivu navrhovatel, 2x spolunavhovatel).

<b>Přehled podaných návrhů projektů v roce 2017</b>		Navrhovatel / Spolunavhovatel	Doba řešení	Dotace pro OU
GAČR - standardní	Dynamika změn ochranných mechanismů rostlin v podmínkách zvýšené koncentrace CO <sub>2</sub> a teploty (reg. č. 18-23702S)	<b>Špunda (BF)</b>	1.1. 2018- 31.12. 2020	4.031.000
GAČR - standardní	Vliv nedvouvrstevných lipidů a nelamelární fáze lipidů na strukturu, dynamiku a funkci tylakoidních membrán rostlin (reg. č. 18-24516S)	<b>Garab (BF)</b>	1.1. 2018- 31.12. 2020	5.412.000
GAČR - standardní	Neobvyklé strategie regulace světla absorbovaného fotosystémem II u smrku ztepilého (reg.č. 18-12178S)	<b>UP Olomouc/Špunda (BF)</b>	1.1. 2018- 31.12. 2020	1.674.000
GAČR - standardní	Fixed-node diffusion Monte Carlo jako referenční metoda pro velké nekovalentní systémy	<b>Dubecký (CHF)</b>	1.1. 2018- 31.12. 2020	5.530.000
GAČR - standardní	Výpočetní materiálové inženýrství dvojdimenzionálních krystalů ve van der Waalových heterostruktur	<b>Karlický F. (CHF)</b>	1.1. 2018- 31.12. 2020	5.599.000
GAČR - standardní	Příprava a charakterizace plovoucího fotokatalyzátoru se synergickou adsorpční funkcí	<b>Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i./ Slovák spolunavhovatel (CH)</b>	1.1. 2018- 31.12. 2020	3.410.000
GAČR - standardní	Uhlíkaté monolity s hierarchickou porozitou z biomasy	<b>Parmentier (CH)</b>	1.1. 2018- 31.12. 2020	5.541.000

c, Kromě uvedených projektů je plánováno podání návrhu projektů do OP VVV PO1 předaplikační výzkum (Hierarchical porous carbonaceous materials as artificial photosynthetic systems for CO<sub>2</sub> conversion. – navrhovatel Slovák) a rovněž výrazné zapojení do dalšího návrhu projektu OP VVVV, výzva: Mezinárodní mobilita výzkumných pracovníků (lze doložit na základě sběru požadavků z pracovišť OU).

d, Další alternativou zajištění udržitelnosti realizovaného výzkumu je zapojení členů týmu do mezinárodních projektů VaV (viz. Program HSV na následující období).

Vzhledem k stávajícím finančním možnostem mateřských kateder fyziky a chemie, budeme, především po dobu rozjezdu grantového financování v dílčí oblasti II a III (případně výpadku financování z grantových prostředků) rovněž usilovat o podporu z fakultních, respektive univerzitních fondů na podporu VaV (např. IRP projekty apod.) a dalších alternativních zdrojů, aby nedošlo ke kritickému útlumu řešitelského kolektivu.



### **Prioritní elektronické databáze literatury:**

- Web of Science
- Wiley Library Online
- SCIENCE DIRECT
- SpringerLink
- Annual Reviews - Biomedical/Life Sciences Collection a Annual Reviews Electronic Back Volume Collection
- Scopus

---

## **Program HSV na následující období (5letý výhled, do 31.12. 2021)**

### **Hlavní cíle ve vědecké oblasti:**

V rámci jednotlivých oblastí výzkumu se zaměřit především na řešení následujících problémů:

#### **Dílčí oblast I, *Variabilita složení a strukturně-funkčních charakteristik tylakoidních membrán vyšších rostlin***

- 1, Identifikovat povahu nedvojrstevných lipidových fází a pochopit jejich význam ve formování, stabilitě a flexibilitě tylakoidních membrán.
- 2, Objasnit interakce mezi lipokaliny a lipidy a jejich vliv na determinaci polymorfismu lipidů tylakoidních membrán (zastoupení dvouvrstevných a nedvojrstevných fází), účinnost regulačních mechanismů a odolnost rostlin vůči oxidativnímu stresu
- 3, Přispět k pochopení odlišnosti mechanismu aklimace fotosyntetického aparátu smrku ztepilého na vysokou a nízkou intenzitu ozáření ve srovnání s ostatními vyššími rostlinami s důrazem na regulaci složení lipidů a proteinů tylakoidních membrán a jejich strukturní a funkční flexibilitu
- 4, Charakterizovat vzájemné působení zvýšené koncentrace CO<sub>2</sub>, zvýšené teploty a různé ozáření (včetně spektrálního složení) na akumulaci flavonoidů, jejich profil a lokalizaci a přispět k objasnění komplexní ochranné funkce flavonoidů u rostlin vystavených měnícím se klimatickým podmínkám.
- 5, Přispět k objasnění příčin různé citlivosti fotosyntetického aparátu rostlin vůči změnám intenzity a spektrálního složení dopadající radiace s důrazem na komplexní propojení signálních cest fotoreceptorů v UV a viditelné oblasti spektra.

#### **Dílčí oblast II, *Výpočetní chemická fyzika***

1. Vývoj metod kvantového Monte Carlo jako referenční metody pro velké nekovalentní systémy
2. Elektronické a optické vlastnosti dvojdimenzionálních krystalů a van der Waalových heterostruktur
3. Referenční výpočty a parametrizace výpočetně méně náročných metod pro aplikace na komplexních a zvláště velkých systémech u kterých dominuje elektronová korelace
4. Chemisorpce, fyzisorpce, interakce a reaktivita materiálů s molekulami

#### **Dílčí oblast III, *Povrchově aktivní uhlíkaté materiály***

1. Rozvinout metody kontrolované přípravy uhlíkatých materiálů s definovanou hierarchickou porozitou (obsahující mikro, meso i makropóry) pro (nejen) adsorpční aplikace.
2. Vytvořit postupy přípravy definovaně porézních uhlíkatých materiálů z environmentálně přijatelných výchozích surovin (dřevo, biomasa, produkty jejich zpracování).
3. Rozšířit možnosti cíleného a definovaného zavedení reaktivních skupin na povrch uhlíkatých materiálů.
4. Objasnit a kvantifikovat vliv jednotlivých typů pórů na kinetiku povrchových procesů.
5. Rozšířit testování potenciálu porézních uhlíkatých materiálů na oblast elektrochemických a fotochemických aplikací.

## **Plánované výstupy:**

### ***a, Důraz na publikace v kvalitních časopisech s IF***

Jak je již zřejmé i z dosavadních publikačních výstupů členů řešitelských kolektivů je převážná část publikací za posledních 5 let publikována v časopisech patřících do 1. kvartilu daného oboru.

**Za předpokladu současného personálního stavu řešitelského kolektivu bude výstupem HSV do konce roku 2021 ca 30 publikací v časopisech 1. kvartilu (snaha bude zajistit, aby alespoň 25% procent z tohoto počtu, byly publikace v časopisech patřících do 1. decilu daného oboru).** Pokud se podaří zajistit plánované personální posílení týmu (viz níže), předpokládáme navýšení počtu publikací v časopisech 1. Q na ca 40, s udržením poměru publikací v top 10% (do 31.12. 2021). ). **Zaměření na kvalitu publikací souvisí s cílem podílet se na zkvalitnění portfolia výsledků VaV OU, respektive PŘF OU, které mají šanci uspět ve „II. pilíři hodnocení VaV“.**

### ***b, Posílení mezinárodní spolupráce a zapojení do mezinárodních projektů VaV***

Výzkum již v současnosti probíhá v těsné spolupráci s předními zahraničními pracovišti (například: Biological Research Centre HAS, Centre of Excellence of the European Union, Institute of Plant Biology, Szeged, Maďarsko (Laboratory of Photosynthetic Membranes, P. Lambrev, B. Ughy et al. ); University of Helsinki Department of Biosciences, Helsinki, Finsko (T.M. Robson); Université Paul Sabatier Toulouse III & CNRS, Francie (B. Lepetit, F. X. Gadea, D. Lemoine), North Carolina State University, USA (L. Mitas), Université de Haute-Alsace, Institut de Science des Matériaux de Mulhouse – IS2M, Francie (J. Parmentier et al.); Department of Applied Physics, University of Eastern Finland, Kuopio, Finsko (Vesa-Pekka Lehto; doloženo řadou společných publikací, viz. Příloha 2 a Letters of Intent v rámci návrhu projektu „Struktura, Interakce, Modelování - Multidisciplinární excelentní výzkum“ (lze přiložit). Například Dr. Dubecký získal díky aktivní mezinárodní spolupráci a svému renomé výpočetní čas v rozsahu cca 9M CPU hodin na výpočetním klastru Argonne Leadership Computing Facility, Argonne National Laboratory, Dept. of Energy, USA v celkové hodnotě cca 150.000,- USD, který umožňuje řešit nejnáročnější úlohy teoretické chemické fyziky. Během následujících 5 let budeme usilovat o navázání nových spoluprací a posílení stávajících. Cílem posílení mezinárodní spolupráce bude mimo jiné zapojení členů týmu do mezinárodních programů VaV. V budoucích letech se jeví například reálné zapojení do připravovaného R&D Programu EU Photosynthesis 2.0 (což by měl být jeden prioritních programů EU v období 2019-2029). **Cílem v této oblasti je do konce roku 2021 zapojení do 3 mezinárodních projektů VaV.**

## **Cíle v personální oblasti**

**Stabilizovat a částečně posílit personální obsazení řešitelského kolektivu v dílčí oblasti 1 a 3, výrazně posílit řešitelský kolektiv v oblasti 2 (Výpočetní chemická fyzika).** Jak již bylo uvedeno v části Ekonomické zajištění, je jak investiční, tak personální rozvoj výzkumu výrazně závislý na externích zdrojích. Kromě aktivní snahy o zajištění prostředků v rámci národních i mezinárodních programů VaV, počítáme i se zapojením do „celouniverzitních projektů“: např. pro možnost zapojení zahraničních doktorandů, postdoků i excelentních vědců do řešitelského kolektivu počítáme se zapojením do projektu OP VVVV, výzva „Mezinárodní mobilita výzkumných pracovníků“ (viz sběr požadavků z pracovišť OU). Vzhledem k stávajícím finančním možnostem mateřských kateder fyziky a chemie, budeme rovněž usilovat o podporu z fakultních, respektive univerzitních fondů na podporu VaV (např. IRP projekty apod.) a dalších alternativních zdrojů.

---

## Příloha 1: Bibliometrické údaje o klíčových členech týmů

Člen týmu	Jimp	B	C	P	Citací	Hi	Zdroj
Ing. Matúš Dubecký, Ph.D.	26				292 (bez autocitací: 230)	11	WOS
Dr. G. Garab, D.Sc. (69 let)	181	10	10	5	<b>3983</b> (bez autocitací: <b>3027</b> )	37	WOS
Mgr. František Karlický, Ph.D.	30				727 (bez autocitací: 647)	13	WOS
Assoc. Prof. Julien Parmentier, Ph.D.	56			2	1924 (bez autocitací 1831)	23	WOS
Doc. RNDr. Slovák Václav, Ph.D.	32				247 (bez autocitací 220)	10	WOS
Doc. RNDr. Vladimír Špunda, CSc.	43				555 (bez autocitací 418)	13	WOS
Mgr. Michal Štroch, Ph.D.	16				162 (bez autocitací 130)	8	WOS

## Příloha 2: Publikace za posledních 5 let.

Jelikož počet článků v impaktovaných časopisech členů týmu je za posledních 5 let velký (např. G. Garab – více než 40; F. Karlický a M. Dubecký – více než 20; J. Parmentier - 19), uvádíme pouze vybrané publikace (5-7 za každého klíčového člena řešitelského kolektivu, řazeno dle abecedního pořadí příjmení klíčových členů týmů). U každé publikace je uveden impakt faktor z roku vydání dané publikace, resp. aktuální IF (2015) u článků z let 2016 a 2017.

**Dubecký M.:** Bias cancellation in one-determinant fixed-node diffusion Monte Carlo: Insights from fermionic occupation numbers; Phys. Rev. E 95, 033308, 2017 (IF 2.252)

**Dubecký M.,** Mitas L., Jurečka P.: Noncovalent Interactions by Quantum Monte Carlo; Chem. Rev. Chem. Rev. 116, 5188, 2016 (IF 37.369)

**Dubecký M.,** Otyepková E., Lazar P., Karlický F., Petr M., Čépe K., Banáš P., Zbořil R., Otyepka M.: Reactivity of Fluorographene: A Facile Way toward Graphene Derivatives; J. Phys. Chem. Lett. 6, 1430-1434, 2015 (IF 8.539)

**Dubecký M.,** Derian R., Jurečka P., Mitas L., Hobza P., Otyepka M.: Quantum Monte Carlo for noncovalent interactions: an efficient protocol attaining benchmark accuracy; Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 20915, 2014 (IF 4.493)

**Dubecký M.**, Jurečka P., Derian R., Hobza P., Otyepka M., Mitas L.: Quantum Monte Carlo Methods Describe Noncovalent Interactions with Subchemical Accuracy; *J. Chem. Theory Comput.* 9, 4287, 2013 (IF 5.31)

Horvathova L, **Dubecký M**, Mitas L, Stich I (2012) Spin Multiplicity and Symmetry Breaking in Vanadium-Benzene Complexes. *Physical Review Letters* 109: 053001 (IF 7.943)

Akhtar P, Zhang C, Do, TN, **Garab G**, Lambrev PH, Tan HS (2017) Two-Dimensional Spectroscopy of Chlorophyll a Excited-State Equilibration in Light-Harvesting Complex II. *Journal of Physical Chemistry Letters* 8: 257-263 (IF 8.539)

Nielsen JT, Kulminkaya NV, Bjerring M, Linnanto JM, Ratsep M, Pederson MO, Lambrev H, Dorogi M, **Garab G**, Thomsen K, Jegerschold C, Frigaard NU, Lindahl M, Nielsen NC (2016) In situ high-resolution structure of the baseplate antenna complex in *Chlorobaculum tepidum*. *Nature Communications* 7: 12454 (IF 11.329)

Herdean A, Teardo E, Nilsson AK, Pfeil BE, Johansson ON, Unnep R, Nagy G, Zsiros O, Dana S, Solymosi K, **Garab G**, Szabo I, Spetea C, Lundin B (2016) A voltage-dependent chloride channel fine-tunes photosynthesis in plants. *Nature Communications* 7: 11654 (IF 11.329)

Nagy V, Vidal-Meireles A, Tengolics R, Rakhely G, **Garab G**, Kovacs L, Toth SZ (2016) Ascorbate accumulation during sulphur deprivation and its effects on photosystem II activity and H<sub>2</sub> production of the green alga *Chlamydomonas reinhardtii*. *Plant Cell Environ.* 39: 1460-1472 (IF 6.169)

Zhang ZY, Lambrev PH, Wells KL, **Garab G**, Tan HS (2015) Direct observation of multistep energy transfer in LHClI with fifth-order 3D electronic spectroscopy. *Nature Communications* 6: 7914 (IF 11.329)

**Garab G** (2014) Hierarchical organization and structural flexibility of thylakoid membranes; *Biochimica et Biophysica Acta-Bioenergetics* 1837: 481-494 (IF 5.353)

Nagy G, Ünnepe R, Zsiros O, Tokutsu R, Takizawa K, Porcar L, Moyet L, Petroutsos D, **Garab G**, Finazzi G, Minagawa J (2014) Chloroplast remodeling during state transitions in *Chlamydomonas reinhardtii* as revealed by noninvasive techniques in vivo. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 111: 5042-5047 (IF 9.674)

**Karlický F**, Otyepkova E, Lo R, Pitonak M, Jurečka P, Pykal M, Hobza P, Otyepka M (2017) Adsorption of Organic Molecules to van der Waals Materials: Comparison of Fluorographene and Fluorographite with Graphene and Graphite. *Journal of Chemical Theory and Computation* 13: 1328-1340 (IF 5.301)

Tuček J., Holá K., Bourlinos A.B., Blonski P., Bakandritsos A., Ugolotti J., Dubecký M., **Karlický F.**, Ranc V., Čépe K., Otyepka M., Zbořil R.: Room temperature organic magnets derived from sp<sup>3</sup> functionalized graphene. *Nat. Commun.* 8, 14525, 2017 (IF 11.329)

Urbanová V, Holá K, Bourlinos AB, Čépe K, Ambrosi A, Loo AH, Pumera M, **Karlický F**, Otyepka M, Zbořil R: Thiofluorographene-Hydrophilic Graphene Derivative with Semiconducting and Genosensing Properties. *Adv. Mater.* 27(14), 2305-2310, 2015 (IF 18.96)

**Karlický F**, Datta KKR, Otyepka M, Zbořil R: Halogenated Graphenes: Rapidly Growing Family of Graphene Derivatives. *ACS Nano* 7(8), 6434-6464, 2013 (IF 12.033)

**Karlický F**, Lazar P, Dubecký M, Otyepka M: The Random Phase Approximation in Surface Chemistry: Water Splitting on Iron. *J. Chem. Theory Comput.* 9(8), 3670–3676, 2013 (IF 5.31)

**Karlický F**, Otyepka M: Band Gap and Optical Spectra of Chlorographene, Fluorographene and Graphane from G0W0, GW0 and GW Calculations on Top of PBE and HSE06 Orbitals. *J. Chem. Theory Comput.*, 9 (9), 4155–4164, 2013 (IF 5.31)

Lazar P, **Karlický F**, Jurečka P, Kocman M, Otyepková E, Šafářová K, Otyepka M: Adsorption of Small Organic Molecules on Graphene. *J. Am. Chem. Soc.* 135(16), 6372–6377, 2013 (IF 11.444)

Braghiroli F. L., Fierro V., **Parmentier J.**, Pasc A., Celzard A. ; Easy and eco-friendly synthesis of ordered mesoporous carbons by self-assembly of tannin with a block copolymer; *Green Chemistry* 2016, **18** (11), 3265–3271 (IF 8.506)

Peter, C.; Derible, A.; Becht, J.-M.; Kiener, J.; Drian, C. L.; **Parmentier, J.**; Fierro, V.; Girleanu, M.; Ersen, O. ; Biosourced Mesoporous Carbon with Embedded Palladium Nanoparticles by a One Pot Soft-Template Synthesis: Application to Suzuki Reactions. ; *J. Mater. Chem. A* 2015, **3** (23), 12297–12306 (IF 8.262)

Braghiroli, F. L.; Fierro, V.; Szczurek, A.; Stein, N.; **Parmentier, J.**; Celzard, A. ; Hydrothermally Treated Aminated Tannin as Precursor of N-Doped Carbon Gels for Supercapacitors. *Carbon* 2015, **90**, 63–74 (IF 6.198)

Schlienger S., Ducrot-Boisgontier C, Delmotte L, Guth J., **Parmentier J.** ; The History of the Micelles: A Key Parameter for the Formation Mechanism of Ordered Mesoporous Carbons via a Polymerized Mesophase. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2014, **118**, 11919–11927 (IF 4.772)

Dubois M., Guérin, K., Ahmad Y., Batische N., Mar M., Frezet L., Hourani W., Bubendorff J.-L., **Parmentier J.**, Hajjar-Garreau S., Simon L. ; Thermal exfoliation of fluorinated graphite.; *Carbon*, 2014, **77**, 688–704. DOI: 10.1016/j.carbon.2014.05.074 (IF 6.196)

Braghiroli F., Fierro V., Izquierdo M.T., **Parmentier J.**, Pizzi A., Celzard A.; Nitrogen-doped carbon materials produced from hydrothermally treated tannin ; *Carbon* 2012, **50**, 5411–5420 (IF 5.868)

**Parmentier J.**, Schlienger S., Dubois M., Disa E., Masin F., Centeno T. A.; Structural / textural properties and water reactivity of fluorinated activated carbons ; *Carbon*, 2012, **50**, 5135–5147 (IF 5.868)

Štefelová, J.; **Slovák, V.**; Siqueira, G.; Olsson, R. T.; Tingaut, P.; Zimmermann, T.; Sehaqui, H. Drying and Pyrolysis of Cellulose Nanofibers from Wood, Bacteria, and Algae for Char Application in Oil Absorption and Dye Adsorption. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering* **2017**, *5*, 2679–2692 (IF 5.267)

Hotová, G.; **Slovák, V.** Determination of the Surface Oxidation Degree of the Carbonaceous Materials by Quantitative TG-MS Analysis. *ANAL CHEM.* **2017**, *89*, 1710–1715 (IF 5.886)

Veselá, P., **Slovák, V.**, Zelenka, T., Koštejn, M. a Mucha, M. The influence of pyrolytic temperature on sorption ability of carbon xerogel based on 3-aminophenol-formaldehyde polymer for Cu(II) ions and phenol. *J ANAL APPL PYROL.* **2016**, *121*, 29–40 (IF 3.652)

Veselá, P.; **Slovák, V.** N-doped carbon xerogels prepared by ammonia assisted pyrolysis: Surface characterisation, thermal properties and adsorption ability for heavy metal ions. *J. Anal. Appl. Pyrolysis* **2014**, *109*, 266–271 (IF 3.564)

Veselá, P.; **Slovák, V.** Organic xerogels based on condensation of different m-substituted phenols with formaldehyde. *J. Therm. Anal. Cal.* **2014**, *116* (2), 663–669 (IF 2.042)

Veselá, P.; **Slovák, V.** Monitoring of N-doped organic xerogels pyrolysis by TG-MS. *J. Therm. Anal. Cal.* **2013**, *113* (1), 209–217 (IF 2.206)

Klem K, Ač A, Holub P, Kováč D, **Špunda V**, Robson TM, Urban O (2012) Interactive effects of PAR and UV radiation on the physiology, morphology and leaf optical properties of two barley varieties. *Environ Exp Bot* 75: 52-64 (IF 2.578)

Urban O, Klem K, Ač A, Havránková K, Holišová P, Navrátil M, Zitová M, Kozlová K, Pokorný R, Šprtová M, Tomášková I, **Špunda V**, Grace J (2012) Impact of clear and cloudy sky conditions on the vertical distribution of photosynthetic CO<sub>2</sub> uptake within a spruce canopy. *Funct Ecol* 26: 46-55 (IF 4.861)

Kováč D, Malenovský Z, Urban O, **Špunda V**, Kalina J, Ač A, Kaplan V, Hanuš J (2013) Response of green reflectance continuum removal index to the xanthophyll de-epoxidation cycle in Norway spruce needles. *J Exp Bot* 64: 1817-1827 (IF 5.794)

Urban O, Klem K, Holišová P, Šigut L, Šprtová M, Teslová-Navrátilová P, Zitová M, **Špunda V**, Marek MV, Grace J (2014) Impact of elevated CO<sub>2</sub> concentration on dynamics of leaf photosynthesis in *Fagus sylvatica* is modulated by sky conditions. *Environ Pollut* 185: 271-280 (IF 4.143)

Šigut L, Holišová P, Klem K, Šprtová M, Calfapietra C, Marek MV, **Špunda V**, Urban O (2015) Does long-term cultivation of saplings under elevated CO<sub>2</sub> concentration influence their photosynthetic response to temperature? *Ann Bot* 116: 929-939 (IF 3.982)

Karlický V, Kurasová I, Ptáčková B, Večeřová K, Urban O, **Špunda V** (2016) Enhanced thermal stability of the thylakoid membranes from spruce. A comparison with selected angiosperms. *Photosynth Res* 130: 357-371 (IF 4.122)

Kováč D, Navrátil M, Malenovský Z, **Štroch M**, Špunda V, Urban O: Reflectance continuum removal spectral index tracking the xanthophyll cycle photoprotective reactions in Norway spruce needles. *Funct. Plant Biol.* 39, 987-998, 2012 (IF 2.471)

Klem K, Holub P, **Štroch M**, Nezval J, Špunda V, Tříška J, Jansen MAK, Robson TM, Urban O: Ultraviolet and photosynthetically active radiation can both induce photoprotective capacity allowing barley to overcome high radiation stress. *Plant Physiol. Biochem.* 93, 74-83, 2015 (IF 2.928)

**Štroch M**, Materová Z, Vrábl D, Karlický V, Šigut L, Nezval J, Špunda V: Protective effect of UV-A radiation during acclimation of the photosynthetic apparatus to UV-B treatment. *Plant Physiol. Biochem.* 96, 90-96, 2015 (IF 2.928)

Nezval J, **Štroch M**, Materová Z, Špunda V, Kalina J: The fate of photoprotective phenolic compounds and carotenoids during acclimation of spring barley (*Hordeum vulgare* L.) and its mutant Chlorina f2 from high to low irradiance. *Biol. Plant.* 61, 73-84, 2017. (IF 1.665)

Materová Z, Sobotka R, Zdvihalová B, Oravec M, Nezval J, Karlický V, Vrábl D, **Štroch M**, Špunda V: Monochromatic green light induces an aberrant accumulation of geranylgeranyled chlorophylls in plants. *Plant Physiol. Biochem.* 116, 48-56, 2017 (IF 2.928)

