



Ceny Neuron pro vědce Fyzikálního ústavu

Jana Žďárská

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

Nadační fond Neuron ocenil 28. září 2021 dva přední vědce Fyzikálního ústavu. V panteonu Národního muzea, kde byly ceny předávány, převzal Václav Petříček nejvyšší udílenou cenu za celoživotní přínos vědě a Prokop Hapala byl Radou Neuronu zařazen mezi sedm dekorovaných nadějných mladých vědců. Oceněno bylo celkem deset vědců.

Ceny Neuron jsou prestižní vědecká ocenění, která jsou udělována již od roku 2009. Laureáti s cenou získávají také osobní finanční prémii z prostředků mecenášů fondu. Garantem výběru laureátů je domácí a mezinárodní vědecká rada, složená z osobností české a světové vědy. Ceny Neuron zvyšují prestiž a motivaci excelentních vědců, kteří mají odvahu měnit budoucnost.

V rámci Nadačního fondu Neuron jsou udělovány dvě ceny. Cena Neuron pro mladé nadějné vědce, kterou může získat vědec či vědkyně za vynikající dosažené vědecké výsledky a jako povzbuzení do další práce, je spojena s osobní prémie 500 000 Kč. Cenu Neuron za přínos světové vědě mohou získat významní vědci, působící doma i v zahraničí, kteří svým objevem nebo dlouhodobou prací zásadně přispěli k rozvoji vědy, posílili jméno České republiky a jsou vzorem a inspirací pro ostatní členy vědecké komunity. Tato cena je spojena s prémie 1 500 000 Kč.

RNDr. Václav Petříček byl oceněn Cenou Neuron za celoživotní vývoj unikátního krystalografického programu JANA¹. Program JANA slouží k výpočtům komplikovaných krystalových struktur na Fyzikálním ústavu AV ČR už více než padesát let. Za jeho vývoj byl Václav Petříček oceněn již několikrát. V roce 2020 obdržel prestižní Pattersonovu cenu², kterou udílí Americká krystalografická asociace jako ocenění mimořádných výsledků v oblasti zkoumání struktury hmoty difrakčními metodami. O tři roky dříve pře-

- 1 Univerzální nástroj pro pokročilou krystalografickou strukturní analýzu.
- 2 Pattersonovu cenu uděluje Americká krystalografická asociace každý třetí rok, počínaje rokem 1981. Cílem je ocenit a podnítit mimořádné výsledky v oblasti zkoumání struktury hmoty difrakčními metodami, včetně významných příspěvků k metodice stanovení struktury a inovativního použití difrakčních metod a/nebo objasnění biologických, chemických a geologických či fyzikálních jevů pomocí nových informací o struktuře hmoty.



Obr. 1 RNDr. Václav Petříček byl oceněn Cenou Neuron za celoživotní vývoj unikátního krystalografického programu JANA.
Foto: FN Neuron



Obr. 2 Prokop Hapala představuje svůj výzkum v rámci diskuze s laureáty Ceny Neuron. Foto: FN Neuron

vzal tento významný český a světový krystalograf Cenu Maxe Perutze³ od Evropské krystalografické asociace. Dalším významným oceněním, které získal Václav Petříček v roce 2013 jako vůbec první český fyzik, je Cena Charlese Barretta⁴ od Mezinárodního centra pro difrakční data.

3 Perutzova cena se uděluje dvakrát za tři roky a vedle ceny Ewaldovy, kterou uděluje každý třetí rok Mezinárodní krystalografická unie, se jedná o nejvyšší ocenění, jehož lze na mezinárodním poli v oboru krystalografie dosáhnout.

4 Cena Charlese Barretta se uděluje jednou za dva roky od roku 1987 jako ocenění vynikajících vědeckých výsledků v oboru práškové difrakce.



Obr. 3 Cenu pro mladé nadějně vědce získal Ing. Prokop Hapala v oboru chemie za objasnění základních principů nové mikroskopické metody s ultravysokým rozlišením. Foto: FN Neuron

Představme si nyní unikátní program JANA, za který výše jmenovaná ocenění Václav Petříček obdržel. Jedná se o dosud nejkomplexnější nástroj pro měření krystalových struktur a používají jej tisíce uživatelů v laboratořích na celém světě. „Nikdy jsem za svůj program nechtěl peníze, jen spolupráci. Když v ní někdo najde chybu nebo má nápad na vylepšení, požádám ho, aby mi jej poslal. Díky tomu jsem navázal spolupráci s nejlepšími laboratořemi světa,“ vysvětluje Václav Petříček. Vznik programu JANA je spojen s jeho vědeckou stáží v laboratoři Philippa Coppense na Univerzitě v Buffalu v roce 1983. A jak sám dodává: „Roční odloučení od rodiny během první stáže v zahra-

ničí ovlivnilo i název vytvořeného programu – je pojmenován po mé dceři.“

Václav Petříček pracuje ve Fyzikálním ústavu AV ČR na pracovišti v Cukrovarnické ulici. A protože často a rád jezdí na kole, využívá tento dopravní prostředek i k cestám do zaměstnání. Ale nejedná se jen o pár kilometrů – Václav Petříček dojíždí do Prahy až od Mělníka, což je za obě cesty celkem téměř 110 km. Ale jak uvádí: „Když už jedu na kole do práce, vypouštím myšlenky na práci samotnou a soustřeďuji se jen na jízdu a užívám si ji, jak to jen jde. Shodou okolností je jak dojezd do práce, tak dojezd domů na Mělník do kopce. A tak nejčastěji myslím především na volbu správného převodu. Sice se při šlapání do kopců trochu zapotím, ale získané endorfiny mi zase hezky zvýší pracovní náladu a elán.“

Cenu pro mladé nadějně vědce získal Ing. Prokop Hapala v oboru chemie, a to za objasnění a teoretické propracování základních principů nové mikroskopické metody s ultravysokým rozlišením. Jeho práce jsou vědeckou komunitou vysoce uznávány jako zásadní pro zobrazení atomů, vazeb a elektrických polí v jednotlivých molekulách.

Světový odborník Prokop Hapala v oblasti teoretických simulací rastrovacích mikroskopů a elektronové struktury křemíkových nanokrystalů získal už v roce 2016 Prémii Otto Wichterleho, kterou uděluje Akade-



Obr. 4 Václav Petříček představuje program JANA v rámci diskuze s laureáty Ceny Neuron. Foto: FN Neuron

mie věd ČR mladým vědcům do 35 let.⁵ Prokop Hapala je spoluautorem publikací v předních vědeckých časopisech (Nature, Chemistry of Materials, Physical Review Letters, Nature Communications a ACS Nano).

Je velmi potěšující, že mezi deseti oceněnými Cenami Neuron jsou dva laureáti z Fyzikálního ústavu AV

⁵ Akademie věd ČR uděluje Prémii Otto Wichterleho vybraným mimořádně kvalitním a perspektivním vědeckým pracovníkům AV ČR, kteří přispívají vynikajícími výsledky k rozvoji vědeckého poznání, jsou nositeli vědeckých hodností nebo titulů (CSc., Dr., Ph.D., DrSc., DSc.) a v kalendářním roce podání návrhu dosáhnou věku nejvýše 35 let.

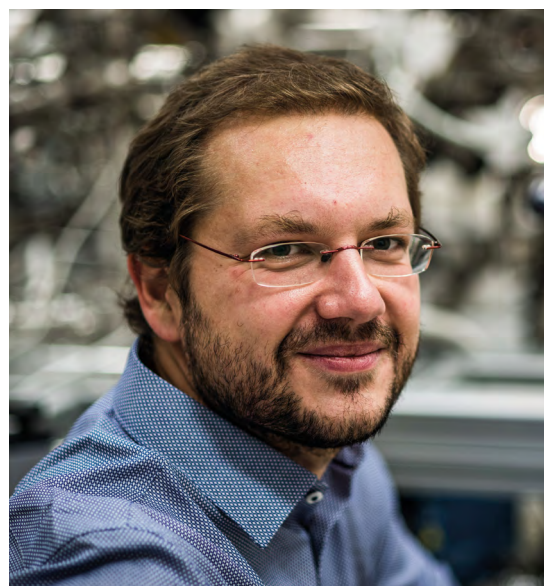


RNDr. Václav Petříček, CSc., narozen v Ústí nad Labem v roce 1948, ukončil studium na Matematicko-fyzikální fakultě Univerzity Karlovy v roce 1972. Svoji diplomovou práci vypracoval pod vedením RNDr. Alana Línka, CSc., z tehdejšího Ústavu fyziky pevných látek ČSAV, kam nastoupil v témže roce jako vědecko-technický pracovník. V roce 1980 obhájil svoji disertační práci ve Fyzikálním ústavu ČSAV, kde pracuje dodnes, s výjimkou občasných zahraničních stáží. Pro jeho vědecký rozvoj byl nejvýznamnější roční pobyt v roce 1984 na univerzitě v Buffalu, USA, kde pracoval pod vedením světově proslulého krystalografa prof. Philipa Coppense. Hlavním tématem pobytu byla aplikace superprostorového popisu modulovaných struktur na konkrétní struktury a vytvoření výpočetního programu JANA pro přepřevádění krystalových struktur. Spolupráce s prof. Coppensem pokračovala i v následujících letech a jejím vyvrcholením byla aplikace nového programu na sérii vysokoteplotních supravodičů na bázi Bi atomu. V dalších letech byl program JANA vyvíjen tak, že v současnosti zahrnuje většinu nástrojů používaných pro řešení a přepřevádění regulérních, modulovaných i magnetických struktur. Po roce 1989 byl zván na řadu evropských pracovišť, kde pomáhal zavádět metody pro studium komplikovaných krystalových struktur (CNRS Institut des Matériaux Jean Rouxel, Nantes, Ecole Centrale Paris, Universita v Bilbau, Limoges, Nancy, Lausanne).

Za svoji práci byl oceněn třemi významnými mezinárodními cenami: Baretovou cenou od ICDD 2013, Cenou Maxe Perutze od Evropské krystalografické společnosti a Pattersonovou cenou od Americké krystalografické společnosti. Od ČSAV a AVČR získal Cenu Akademie v roce 1983 a 2017, Premium Academiae ve roce 2007. Dále obdržel Cenu Učené společnosti České republiky v roce 1996 a konečně Cenu Neuron za přínos světové vědě v roce 2021.

Václav Petříček publikoval více než 330 prací v impaktovaných časopisech, s více než 7 300 citací a dosáhl H-indexu 37.

ČR. Za celou redakci Československého časopisu pro fyziku přejeme našim kolegům mnoho dalších úspěchů jak na poli vědy, tak i v soukromém životě.



Ing. Prokop Hapala, Ph.D., narozen v roce 1984, dokončil doktorské studium na Matematicko-fyzikální fakultě Univerzity Karlovy v roce 2016 a ještě téhož roku byl oceněn Wichterleho premií udělovanou Akademií věd České republiky. Po ukončení studia absolvoval dvě pětiměsíční stáže na Univerzitě v Amsterdamu a na Georg-August-Universität v Göttingenu. Následně pracoval na postdoktorské pozici na Aalto University ve Finsku a od návratu ze zahraničí v roce 2019 působí ve Fyzikálním ústavu AV ČR.

V průběhu studia se Prokop zabýval teoretickými simulacemi molekulárních nanostruktur umístěných na povrchu pevných látek a rozvojem rastrovací mikroskopie (AFM/STM). Objasnil základní mechanismy submolekulárního rozlišení těchto zobrazovacích metod dosaženého pomocí hrotů zakončených molekulou oxidu uhelnatého (CO), atomem xenonu (Xe), případně jiným molekulárním adsorbátem. Vysvětlil zkreslení naměřených obrazů v důsledku vychylování koncové molekuly a také vliv elektrostatického pole na zobrazovací proces, což je klíčové pro rozlišení kovalentních a vodíkových vazeb v molekulách. Na základě těchto analýz vyvinul program pro simulace AFM a STM mikroskopie se submolekulárním rozlišením, který je dnes široce využíván po celém světě. Prokop Hapala dále navrhl metodu umožňující z deformací obrazů AFM mikroskopu rekonstruovat elektrostatické pole molekul. Zvláště užitečné byly jím vyvinuté metody při studiu hydratovaných iontů sodíku na povrchu kuchyňské soli, kde pomohly poprvé nahlédnout do mikroskopických detailů rozpouštění iontových krystalů.

Během postdoktorského pobytu ve Finsku využil svých dosavadních zkušeností při práci na metodě automatické rekonstrukce trojrozměrné geometrie molekul z AFM obrazů. Tato metoda by mohla v budoucnu pomoci při strukturní analýze unikátních molekul ve složitých směsích (jako ropa), pro něž jsou stávající metody strukturní analýzy (například rentgenová a neutronová difrakce) nepoužitelné.

Vedle výše uvedeného se zabývá studiem struktury a luminiscence křemíkových krystalů, pro které vyvinul metodu *fuzzy* pásové struktury, která přenáší koncept pásové struktury používaný k popisu nekonečných krystalů pevných látek na konečné objekty. Prokop Hapala se také dlouhodobě věnuje vývoji rychlých výpočetních metod, pohybujících se na hranici mezi kvantověmechanickými výpočty a klasickými výpočty s empirickými silovými poli. Sem spadá jeho významný podíl na vývoji programového balíku Fireball, umožňujícího simulace systémů složených z tisíců atomů.