

## Stane se stokrát vyřčená lež pravdou?

*Komentář k vyjádření děkana PŘF UP k případu Nature Communications*

V úvodu dovoďte drobné připomenutí geneze případu. V letech 2014-2015 byl připravován článek „Air-stable superparamagnetic metal nanoparticles entrapped in graphene oxide matrix“, jenž popisuje přípravu a vlastnosti velmi malých částic železa, které vykazují tzv. superparamagnetismus. Ke stabilizaci takových nanočástic došlo díky použití uhlíkové matrice na bázi grafenu. Pro prokázání stability vzorku byla použita metoda Mössbauerovy spektroskopie a do Supplementary Data byla vložena tabulka S1 s hyperjemnými parametry fitu spekter, měřenými plochami a také obrázek S6, kde došlo k záměně z důvodu podobnosti mezi jednotlivými spektry. Místo tří různých (avšak velmi podobných spekter) byl tak vložen třikrát stejný graf. Této chyby si nevšiml žádný z autorů, editorů ani recenzentů, neboť vzorek se v rámci studia stability v podstatě nezměnil a spektra se tak dala snadno zaměnit. Po upozornění na chybu byla tato neprodleně standardní cestou napravena vydáním Corrections, která byla redakcí beze zbytku přijata.

Tímto by příběh pro vědeckou komunitu mohl skončit, pokud by následně nedošlo k dalšímu neobvyklému zkoumání na půdě PŘF UP, napadajícímu nedostatečná data na podporu stability vzorku na vzduchu. V důsledku toho skončil odpovědný autor doc. Jiří Tuček v pracovní neschopnosti a následně rozvázal pracovní poměr na UP. Ve snaze očistit doc. Tučka, kterého považujeme za špičkového vědce a morálně pevného člověka, a ve snaze vyvrátit nepodložené tvrzení, jsme dohledali původní měřený vzorek a provedli opakované měření. Při zafixování hyperjemných parametrů tak, jak byly uvedeny v článku, jsme i po pěti letech měřením získali stejné amplitudy (poměry jednotlivých komponent) – v souladu s daty uvedenými v původní publikaci. Tento postup je zcela běžný při kvantitativní analýze v Mössbauerově spektroskopii, kdy se záměrně respektuje použitý model pro posouzení kvantitativních změn v amplitudách. Při uvolnění parametrů se více projevuje oxidovaná komponenta, což není nijak překvapivé, když si uvědomíme, že vzorek je starý téměř pět let a stabilita byla v článku reportována jen po měsíci. Přítomnost superparamagnetického železa je naprosto nezpochybnitelná i po pěti letech. Nanoželezo na vzduchu totiž obvykle oxiduje velmi prudce a v řádu sekund shoří. Tím by se dal příběh uzavřít s tím, že se skutečně podařilo připravit stabilní superparamagnetické železo, tak jak bylo popsáno v článku, které je navíc výjimečně stabilní po výrazně delší dobu, než se očekávalo.

V poslední době se ovšem objevila další vyjádření, která tuto již uzavřenou kauzu znovu rozvířují. Omlouváme se tedy, že vás musíme zatěžovat tímto dalším dlouhým textem, avšak nemůžeme ignorovat překrucování reality, jakého jsme v posledních dnech svědky. Posledním z takových textů je „[Vyjádření děkana PŘF UP k případu Nature Communications](#)“, jež obsahuje celou řadu zavádějících i zcela nepravdivých informací, vůči kterým se musíme ohradit. Pro jednoduchost vždy citujeme příslušné vyjádření pana děkana a následně připojujeme náš komentář.

Vyjádření: „V přírodovědné komunitě se rozběhly debaty o prošetřování věrohodnosti dat v článku Air-stable superparamagnetic metal nanoparticles entrapped in graphene oxide matrix, Nature Communications 7, 12879 (2016). Vzhledem k tomu, že jsem od pana rektora dostal vyrozumění, že Etická komise případ řešit nebude, nejedná se již v rámci standardních mechanismů akademických orgánů o „živý případ“, a abych omezil prostor pro spekulace plynoucí z nedostatku informací, chci se touto cestou k případu oficiálně vyjádřit.“

Komentář: Bohužel se domníváme, že debaty se nerozvíhají samy, ale jsou účelově podněcovány a rozvířovány, za pomoci emocí a zavádějících informací. Vyjádření pana děkana je toho bohužel živým důkazem.

Vyjádření: „V případě jde o to, že klíčová vlastnost, kterou má být v nadpise deklarovaná stabilita materiálu na vzduchu, je v článku prokazována jediným experimentem, avšak tři grafy zobrazující stav vzorku „v čase nula“ a později, jsou nikoliv podobné, nýbrž zcela identické. Nejedná se tedy o záznam tří měření, ale o trojnásobnou kopii téhož záznamu. Případ jsem dosud řešil zcela standardně: po obdržení oznámení jsem nechal vypracovat znalecký posudek, který potvrdil, že všechny grafy byly vytvořeny ze stejného souboru dat, a následně jsem sestavil nezávislou komisi, která měla prošetřit bližší okolnosti případu.“

Komentář: Pan děkan by ušetřil peníze daňových poplatníků, kdyby se doc. Tučka na pochybení zeptal. Doc. Tuček nikdy svou technickou chybu nepopíral a okamžitě podnikl kroky k nápravě. Nepochybně by to udělal bez znaleckých posudků i bez nutnosti svolávat jakoukoliv komisi. Lidské chyby k vědě patří a nástroje typu Corrections jsou tu od toho, aby byla tato pochybení napravena. Za zmínku stojí i fakt, že v doprovodné tabulce, která prezentuje zjištěné hyperjenné parametry, jsou hodnoty uvedeny od počátku správně.

Vyjádření: „Komise ve své zprávě konstatovala, že dr. Novák, který sice není spoluautorem, ale měl podle znění poděkování dotčená spektra měřit, popírá, že by je měřil. Doc. Tuček, který se jakožto první autor k měření přihlásil, uvedl, že se jednalo o technickou chybu, kdy spektra do obrázku jen špatně zkopíroval. Komisi následně prezentoval „správná spektra“ a autorský tým požádal redakci o Corrigendum, které později skutečně vyšlo. Komise vyslovila pochybnosti o věrohodnosti tvrzení, že se jednalo jen o technickou chybu, a to z následujících důvodů:“

Komentář: Komise, v níž nebyl žádný odborník na tuto problematiku, se opírala pouze o posudek bývalého kolegy doc. Jiřího Pechouška. Ten je z podstaty věci podjatý, neboť doc. Tuček byl léta jeho přímým nadřízeným a mají řadu společných publikačních výstupů.

Vyjádření: „1) V původní verzi článku se nejedná o tři přesně stejné grafy. Data jsou sice identická, ale první graf má jiné měřítko (horizontální osa je roztažená).

Komentář: Ad 1) Zde si pan děkan sám protiřečí, neboť o několik řádků výše uvádí, že jsou grafy „zcela identické“. Správná data jsou si velmi podobná, mohlo tedy dojít k chybě už při jejich zpracování do obrázků. Přesvědčení, že se jedná o snadno přehlédnutelnou chybu, podporuje i fakt, že si toho nevšiml žádný odborný recenzent.

Vyjádření: 2) Autoři nebyli schopni dodat surová data ze spektrometru ani k původním grafům ani ke grafům v corrigendu, přitom podle informací doc. Pechouška jsou data v laboratoři uchovávána a denně zálohována.

Komentář: Ad 2) Pan děkan zcela opomíjí klíčový fakt, že data byla filtrována s využitím softwaru, který slouží k potlačení šumu a který je v práci řádně citován (doc. Pechoušek je jedním ze spoluautorů článku popisujícího tento software). Tato filtrovaná data tým autorů, dle prohlášení ve článku, uchovává. Interpretované grafy, které z nich vycházejí byly předány komisi. Laboratoře jsou vybaveny řadou spektrometrů fungujících pro různé účely (vědecké i komerční měření) a z technických důvodů ne všechny provádějí automatickou zálohu na server, takže také toto tvrzení je nepřesné.

Vyjádření: 3) Nové grafy dodané doc. Tučkem vykazují ve srovnání s jinými mössbauerovskými spektry měřenými za obdobných podmínek neobvykle nízký šum a doc. Pechoušek vyslovil ve svém posudku pochybnosti o jejich věrohodnosti.“

Ad 3) Toto tvrzení opět, a neubráníme se pocitu že záměrně, zcela ignoruje skutečnost, která byla prezentována i na zasedání AS PŘF UP a současně je přístupná každému, kdo si článek přečetl. Konkrétně jde o informaci, že spektra byla před fitováním filtrována za účelem zpřesnění interpretace. Software, který k tomu byl použit, je ve článku řádně citován. Tento článek z roku 2010 explicitně uvádí, že filtrace šumu je jeden z možných postupů zpřesnění interpretace surových dat. Je tedy pravděpodobné, že doc. Pechoušek o použití filtrace šumu u zkoumaných spekter nevěděl a zcela logicky se domníval, že surová spektra z přístroje by takto vypadat neměla.

Vyjádření: „Absence datových souborů neumožňuje provedení matematických testů, které by mohly ukázat, zda byla data zmanipulovaná. Nicméně vzhledem k výše uvedeným podezřelým okolnostem (přičemž absence dat je jednou z nich) komise doporučila předat případ k prošetření Etické komisi UP, která má větší pravomoci, což jsem učinil.“

Komentář: Toto vyjádření popírá princip presumpce nevinny a automaticky předpokládá vinu – je snaha prokázat, že byla data zmanipulovaná? Fakt, že je takto přístupováno k člověku s tak vysokým morálním i odborným kreditem, jako je kolega, který se spektry pracoval, je přinejmenším velmi překvapivý.

Vyjádření: „V průběhu prázdnin se mi podařilo získat explicitní sdělení doc. Tučka i prof. Zbořila, že surová data k předmětným experimentům nemají. Prof. Zbořil poslal opět jen obrázky grafů, nicméně při srovnání s grafy, které poskytl komisi doc. Tuček, si můžeme všimnout, že graf vpravo nahoře označený „Iron\_Promyty\_300K\_Raw“ má rozsah vertikální osy od 39 820 000 do 39 920 000, zatímco tentýž graf (podle polohy jednotlivých bodů jde o stejný dataset) poskytnutý prof. Zbořilem má rozsah od 42 480 000 do 42 560 000. Vzhledem k tomu, že jednotkou jsou „counts“ (podle grafů, které jsou v souboru prof. Zbořila níže), tedy počet záznamů na detektoru, nemohou oba grafy reprezentovat záznam měření a je evidentní, že k manipulaci s hodnotami došlo.

Komentář: Lze si snadno všimnout, že nejde o tentýž dataset, jak tvrdí pan děkan. Jeho název se liší dodatečným číslem 2 v případě dat zaslaných prof. Zbořilem a číslem 3 v případě doc. Tučka. Je také možné si všimnout, že poloha bodů není identická a z přiloženého vyhodnocení je také snadno viditelné, že hyperjenné parametry se u obou grafů nepatrně liší. Tvrzení pana děkana je tedy zcela prokazatelně nepravdivé. Jedná se totiž zcela jistě o spektra téhož vzorku lišící se pouze dobou sběru dat. Doc. Tuček dodal komisi data s o něco kratší dobou měření (nicméně s téměř totožnou vypovídací hodnotou). Prof. Zbořil dodal spektrum s vyšším počtem countů, jednoduše řečeno stejné spektrum měřené o něco delší dobu. Protože měření často trvá řadu dní, průběžné sledování a interpretace měřeného spektra jsou naprosto běžné. Po použití filtrační procedury jsou obě spektra dostatečné statistické kvality a mají stejnou vypovídací hodnotu z hlediska hyperjenných parametrů i kvantifikace jednotlivých spektrálních komponent. Nejedná se tedy o žádnou manipulaci. Doc. Tuček zjevně prof. Zbořilovi poskytl data s maximální statistickou kvalitou (tedy data ke spektru přímo v uvedeném v článku) a ten je předal panu děkanovi. Komise obdržela de facto totožné spektrum, pouze měřené kratší dobu, a tudíž s o něco nižší statistikou. Tato skutečnost je pro nás jasný důkaz, že doc. Tuček spektra skutečně a nepochybnitelně měřil a průběžně je zkoumal.

Vyjádření: V publikaci jsou potom data normovaná na úroveň signálu pozadí a prezentovaná jako transmitance. V původním grafu je patrný maximální pokles transmitance zhruba o 0,7%, v publikovaném corrigendu je pro jistotu rozsah vertikální osy uveden bez číselných hodnot (!) v arbitrárních jednotkách, což je samo o sobě u transmitance nesprávně, neboť je to veličina bezrozměrná. Z obrázku poskytnutých jak doc. Tučkem, tak prof. Zbořilem je však patrné, že došlo k poklesu pouze zhruba o 0,2%. To znamená, že do publikace si autoři „vylepšili“ signál více než trojnásobně.“

Komentář: Zde je patrné, že pan děkan nerozumí Mössbauerově spektroskopii a nemá s ní žádné zkušenosti. Uvádění vertikální osy bez hodnot „countů“ je v tomto oboru zcela běžné (někdy se dokonce neuvádí vůbec žádná osa Y!). To by pan děkan snadno zjistil už při letmém pohledu do nějakého konferenčního sborníku. Ve skutečnosti totiž „procentuální pokles“, tedy Mössbauerův efekt, nesouvisí s interpretací spektra, na kterou nemá žádný vliv. Mössbauerův efekt vypovídá o množství vzorku, množství cílového izotopu ve vzorku, geometrii spektrometru, kalibraci, citlivosti a typu detektoru nebo například i o aktivitě radioaktivního zářiče – tedy i naprosto identický vzorek může na jiném spektrometru vykazovat významné odlišnosti v Mössbauerově efektu. Pokud byly v původním článku uvedeny chybně jiné grafy, není nijak podivné, že vykazovaly jiný Mössbauerův efekt, obzvlášť pokud byly vzorky měřeny na různých spektrometrech.

Vyjádření: „Na základě těchto zjištění jsem panu rektorovi zaslal doplnění žádosti o prošetření případu Etickou komisí s podezřením na porušení Etického kodexu v čl.3, odst. 3 („vědecký pracovník si uvědomuje svoji odpovědnost za objektivitu, spolehlivost a přesnost svého bádání a respektuje meze používaných metod“), odst. 4 („vědecký pracovník při zveřejňování svých poznatků a výsledků dbá na jejich úplnost, ověřitelnost a objektivní interpretaci“) a odst. 5 („vědecký pracovník po zveřejnění svých výsledků uchovává primární data a dokumentaci po dobu obvyklou v příslušném oboru, pokud tomu nebrání jiné legitimní závazky nebo předpisy“). Doplnil jsem také upozornění na dlouhodobou pracovní neschopnost doc. Tučka, ovšem s poznámkou, že dle mého názoru už poskytl všechny relevantní informace a pro došetření případu není jeho další osobní předvolání nezbytně nutné. Očekával jsem, že poté bude případ EK neprodleně předán. Pan rektor se skutečně v přítomnosti pror. Banáše s Etickou komisí k projednání případu sešel, nicméně následně jsem obdržel vyjádření, že EK se případem zabývat nebude a záležitost že máme projednat na Vědecké radě PŘF. Z další komunikace jsem ovšem zjistil, že EK nebyla seznámena s obsahem mého doplnění žádosti a podstatné informace, které do značné míry případ vyjasňují, jí tedy nebyly předány.“

Komentář: Jak bylo ukázáno výše, zjištění pana děkana jsou v mnoha ohledech mylná a zavádějící. Proto není vůbec překvapivé, že pan rektor spolu s Etickou komisí rozhodli toto dále nezkoumat. Není ovšem vůbec jasné, jak by měly tyto chybné nebo zavádějící informace od pana děkana situaci vyjasňovat.

Vyjádření: „Následovalo vystoupení dr. Navařika na zasedání AS PŘF, které je blíže popsáno zde. Ten prezentoval přeměření původního vzorku, které mělo s velkou přesností potvrdit předchozí výsledky, což uvádějí i spoluautoři původního článku na webu RCPTM zde. Nicméně v dalších diskuzích na UP Reflexi dr. Navařík přiznal, že při fitování byly zafixovány všechny parametry, což v překladu znamená, že v tomto případě matematické vyhodnocení bylo zcela vyfabulováno a nemá s naměřenými daty nic společného.“

Komentář: Popis vystoupení na senátu je velmi subjektivní a zavádějící. Toto vystoupení mělo za cíl: 1) Ve zkratce popsat senátorům vývoj kauzy. 2) Poukázat na fakt, který byl doposud ignorován – a tedy že před fitováním byl ze surových dat pomocí řádně ocitovaného SW filtrován šum. 3) Ukázat nové výsledky analýzy původního vzorku, které prokazují, že je materiál výjimečně stabilní, i po několik let (tedy nejen 30 dní, jak je uvedeno v článku). Je také důležité upozornit na to, že pan prof. Opatrný zveřejnil prezentaci bez souhlasu jejího autora (souhlas si vyžádal, ale nečekal na něj). Autor mezitím připravoval k prezentaci detailní komentář, který obsahoval i všechny tyto podrobnosti. Závěrečné tvrzení o vyfabulovaném vyhodnocení je však bohužel prokazatelně zcela lživé. Pro potřeby ověření starého fitu byly fixovány sice všechny hyperjemné parametry (tedy pozice křivek), nikoliv však jejich amplitudy, které určil profesionální analytický SW. Je v podstatě zcela vyloučeno, aby bylo možno bez měření takto přesně odhadnout jak hyperjemné parametry, tak amplitudy – toto poukazuje na fakt, že původní data vychází zcela jednoznačně ze skutečného měření. Při změně pozic čar logicky dochází i ke změně vypočtených amplitud, avšak všechny testované modely nezávisle na sobě prokazují stabilitu vzorku, tedy přítomnost singletu superparamagnetického železa – a to je nakonec i nejdůležitější závěr, který sám pan děkan zdůrazňuje jako „klíčovou vlastnost, kterou má být v nadpise deklarovaná stabilita materiálu na vzduchu“, hned ve druhém odstavci jeho vyjádření. Totéž konstatuje i nezávislý posudek: <https://www.zurnal.upol.cz/nc/zprava-int/clanek/externi-expertni-fitovani/>.

Vyjádření: „Podezření, že s daty, která byla prezentována v dotčeném článku i v corrigendu, bylo manipulováno, případně že vůbec nepocházejí z reálných měření, je důvodné a absenci experimentálních dat v experimentální studii považuji za zásadní problém pro věrohodnost práce. To, že došlo k porušení Etického kodexu, považuji za zcela evidentní. Další komunikace autorů této práce a jejich kolegů bohužel podezření spíše prohlubují. Vzhledem k provázanosti výzkumu v přírodních vědách je věrohodnost publikovaných dat zcela zásadní pro přijímání dalších výsledků pracoviště komunitou a má vliv na možnosti publikování prací i úspěšnost v grantových soutěžích. V rámci globální vědy jde o malý příběh, se kterým se komunita přírodovědců určitě vypořádá, ovšem fakt, že případ není schopná vyřešit UP pomocí standardních mechanismů, které k tomu má, vnímám jako symptom selhávání jejich orgánů. Věřím, že alespoň fakulta se dokáže s problémem vypořádat se ctí.“

Komentář: Jak bylo ukázáno, podezření, o kterých pan děkan mluví, se zakládají na zavádějících a nepravdivých argumentech, tedy podezření není nijak důvodné. Naopak prokázání stability superparamagnetického železa po několika letech lze považovat za výjimečnou záležitost potvrzující význam práce a dalece překračující očekávání původního článku. Další komunikace však probíhala zcela jinak, než naznačuje pan děkan. V této souvislosti byla naopak vyvinuta maximální možná součinnost, včetně dodání nově získaných dat a rychlých odpovědí na dotazy v rámci emailů, UP Relfexe i diskuzí na Facebooku. Došlo i na opakované nabídky k osobnímu jednání, které byly druhou stranou ignorovány. Na rozdíl od pana děkana se na základě uvedených skutečností domníváme, že případ byl pomocí standardních mechanismů vyřešen a vyhodnocen zcela správně – tedy uzavřen. Na vypořádání se se ctí je dle našeho názoru již pozdě, neboť celá tato zbytečná kauza vyprodukovala obrovské množství škod a nenávisti, což někteří z nás pocítují téměř každý den.

Na závěr však můžeme dodat i jeden silný souhlas s panem děkanem. I my se domníváme, že zde dochází k pravidelnému porušování Etického kodexu, ale i základních lidských a morálních hodnot. V názoru na původce takového jednání se ale očividně rozcházíme.

Jakub Navařík & Ondřej Malina  
Laboratoř Mössbauerovy spektroskopie na RCPTM