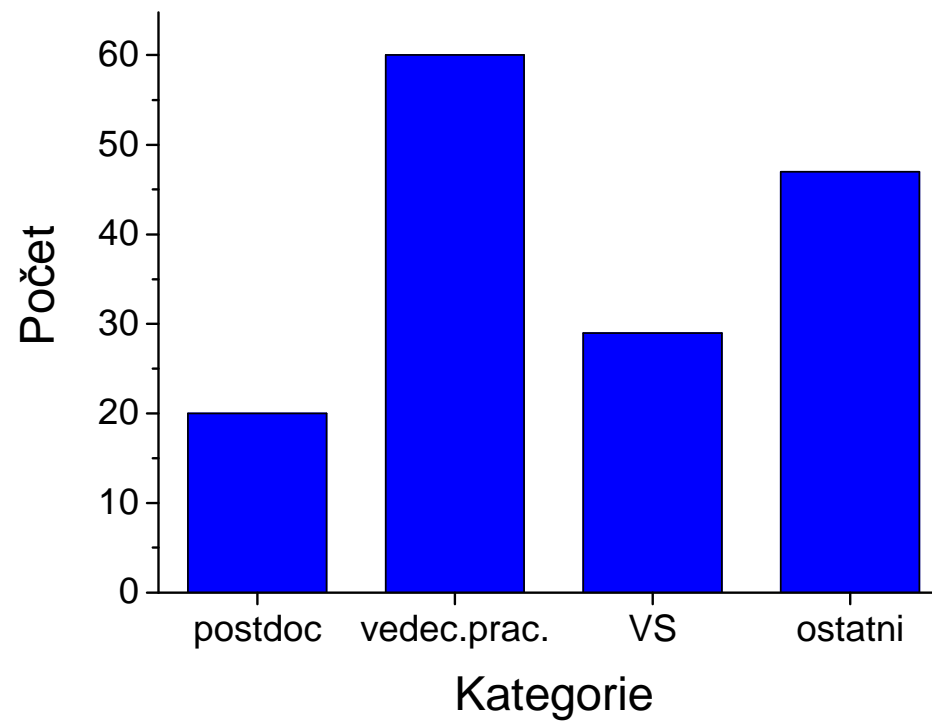


Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR, v.v.i.



Rozdělení zaměstnanců ÚFCH JH podle kategorií



Celkem 156 přepočtených úvazků

Výzkumný záměr (2005-2011)

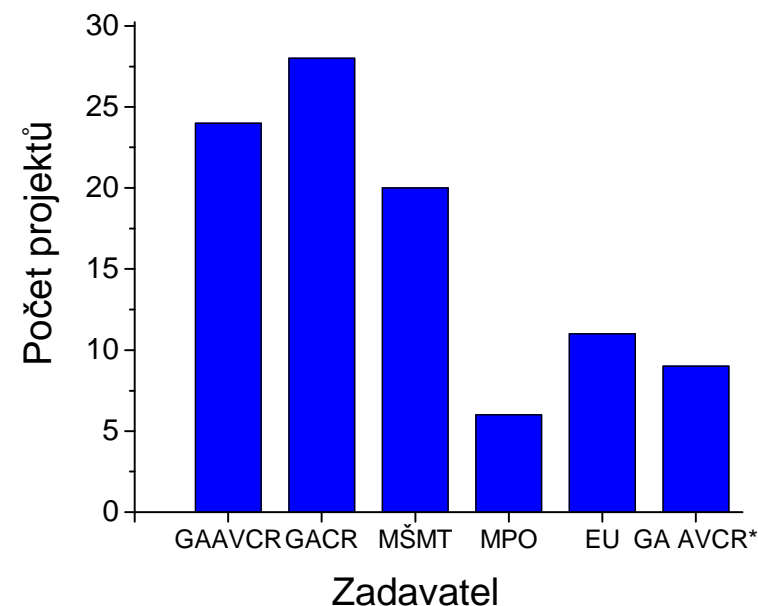
Struktura, reaktivita a dynamika
molekulárních a biomolekulárních systémů:
teorie, experiment, aplikace

Vědecká oddělení ústavu

- **Teoretická chemie** (J. Pittner)
teoretická a aplikovaná kvantová chemie
- **Chemická fyzika** (S. Civiš)
molekulová a povrchová spektroskopie, hmotnostní spektrometrie
- **Biofyzikální chemie** (M. Hof)
biospektroskopie a bioelektrochemie
- **Struktura a dynamika v katalýze** (Z. Sobalík)
mikro- a mesoporézní materiály pro katalytické aplikace
- **Syntéza a katalýza** (J. Čejka)
zeolity a mesoporézní molekulová síta
- **Elektrochemické materiály** (L. Kavan)
nanouhlík, nanostrukturní TiO_2
- **Elektrokatalýza** (Z. Samec)
nanokrystalické oxidy, kapalná rozhraní
- **Molekulární elektrochemie** (M. Hromadová)
mechanismus a kinetika elektrodových reakcí

Zdroje financování: dotace ze státního rozpočtu a EU

Zdroj	Neinvest. (mil. Kč)	Investiční (mil. Kč)
AVČR	77,7	14,5
GAAVČR	8,9	0,3
Nanotechnologie pro společnost	5,1	3,1
NPV	7,4	
GAČR	12,4	1,6
MŠMT	16,0	
MPO	3,7	
CELKEM	131,2	19,5

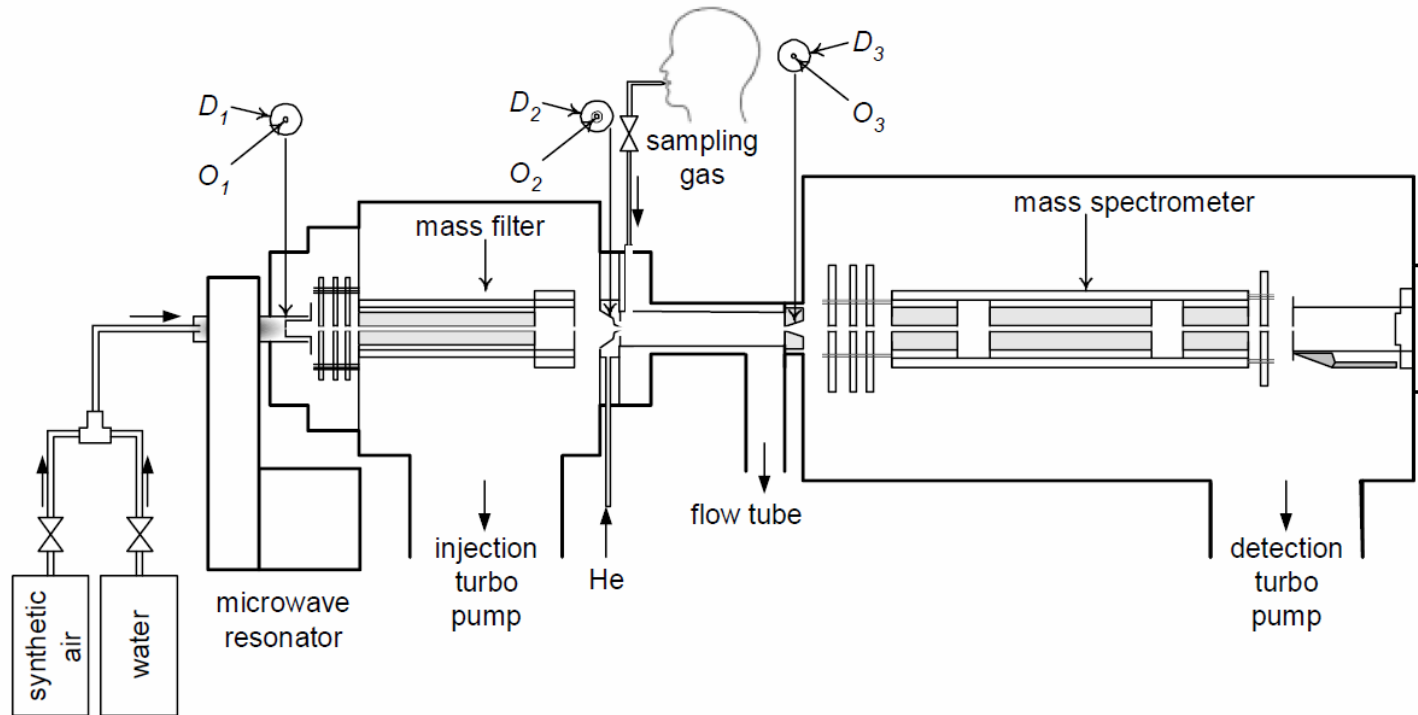


2008: Celkem 98 řešených projektů

Skupina hmotnostní spektrometrie (P. Španěl)

- Hmotnostní spektrometrie v proudové trubici s vybranými ionty, *Selected Ion Flow Tube Mass Spectrometry* (SIFT-MS)
- Na základě znalostí o atmosférické iontové chemii a s využitím výsledků kinetiky reakcí iontů s molekulami získaných na ÚFCH-JH v posledních 10 letech je možné určovat stopové koncentrace látek přítomných ve vzduchu, lidském dechu a jiných plynech.
- Metoda SIFT-MS pracuje v rozsahu koncentrací stopových plynů do $1:10^9$ a výsledky jsou k dispozici během několika sekund.

Selected ion flow tube mass spectrometry



- Ionty-prekursorů jsou připraveny pomocí hmotnostního filtru tak, aby nereagovaly s hlavními složkami vzduchu jako N_2 , O_2 a CO_2
- Selektivní chemická ionizace stopových látek probíhá v proudové trubici v heliu během definované reakční doby
- Ionty charakteristické pro jednotlivé látky jsou analyzovány a kvantifikovány pomocí hmotnostního spektrometru.
- S použitím rychlostních konstant získaných předchozím měřením je vypočítána koncentrace látek z poměrných intenzit iontových signálů a z měřeného tlaku a průtoku vzorku proudovou trubicí.

Výsledky

- Vytvoření diagnostické metody pro přesné kvantitativní stanovení množství HCN, formaldehydu, acetaldehydu a dalších látek ve vzduchu za přítomnosti vodní páry
- Stanovení rozdělení koncentrací acetonu, amoniaku a HCN v dechu populace ve věkovém rozmezí 4 až 83 let
- Porovnání těkavých látek v dechu pacientů s astmatem získaných přímým měřením s látkami přítomnými ve zmrazených vzorcích kondenzátu

Oddělení biofyzikální chemie (M. Hof)

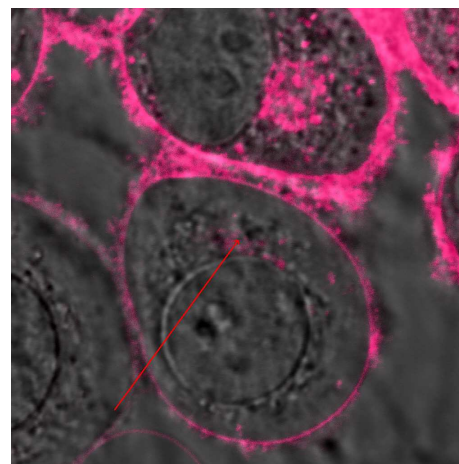
Fluorescenční spektroskopie a mikroskopie biologických modelových systémů a živých buněk

- vývoj nových fluorescenčních technik
- řešení problémů spojených s modely membrán, „molekulární zhutnění“ DNA, vztah struktura-funkce v proteinech
structure/function relationship in proteins
- pokročilé techniky zobrazování živých buněk

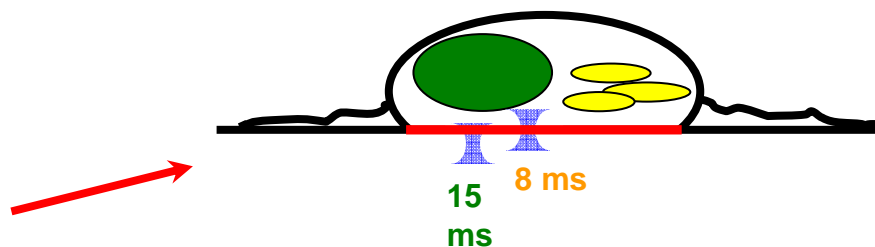
Lipidické monovrstvy na kapalných rozhraních

Pokročilé metody zobrazování živých buněk

- Použití špičkové fluorescenční spektroskopie v biologii buňky
- Spolupráce s UMG AV ČR, Fyziologickým ústavem AV ČR, Karlovou Univerzitou ve výzkumném centru MŠMT LC06063, koordinátor M. Hof



Identifikace mikrodomén v OLN-93 oligodendroglialních buňkách o rozměrech menších, než rozlišení optického mikroskopu



Oddělení syntézy a katalýzy (J. Čejka)

Syntéza

zeolity

mesoporézní molekulová síta

hierarchické materiálů s různou úrovní porosity

organometalické sloučeniny přechodových kovů

metallocenové, vícejaderné komplexy přechodových kovů

Katalytické aplikace

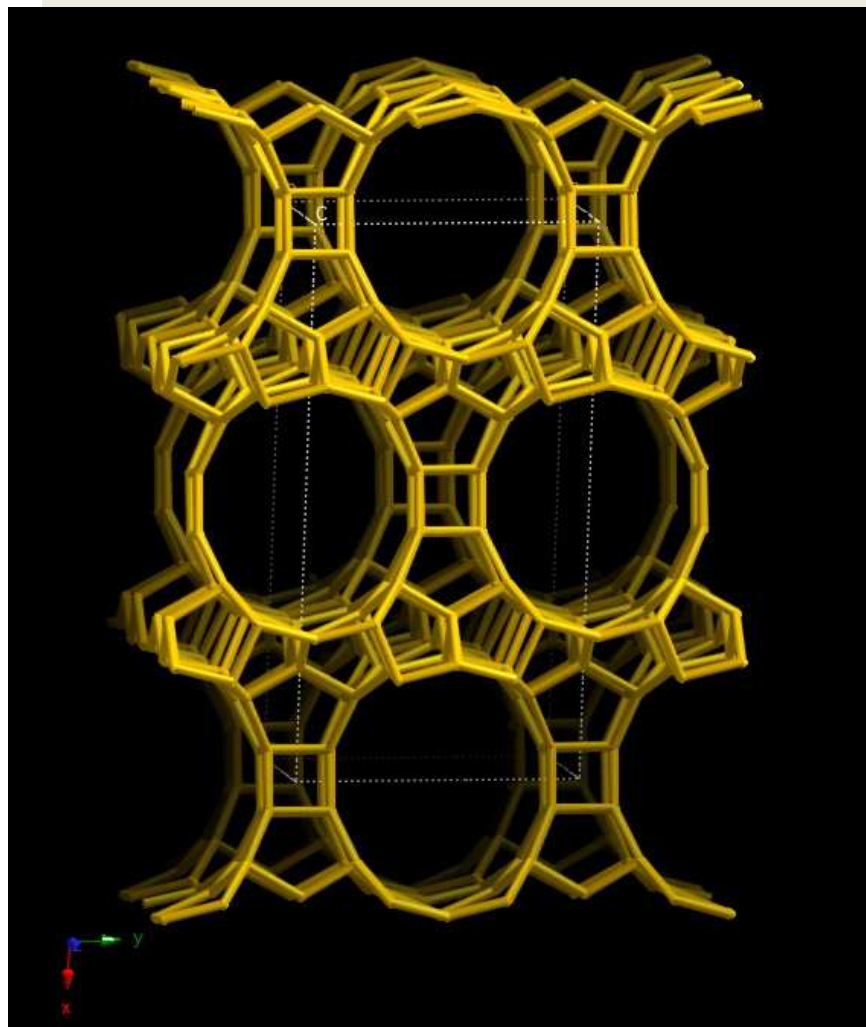
petrochemické reakce

syntéza speciálních chemikálií

lineární dimerizace a oligomerizace terminálních alkynů

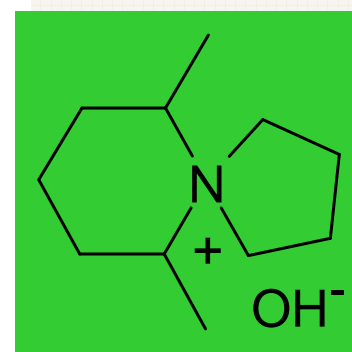
polymerizace olefinů

Nové typy zeolitů

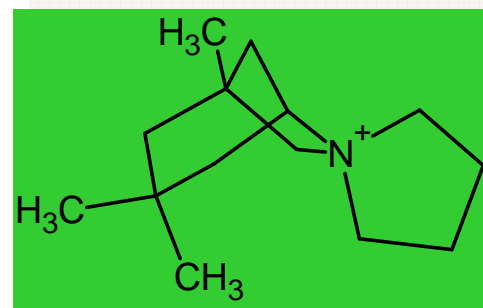


První zeolit se 14 a 12-četnými kanály

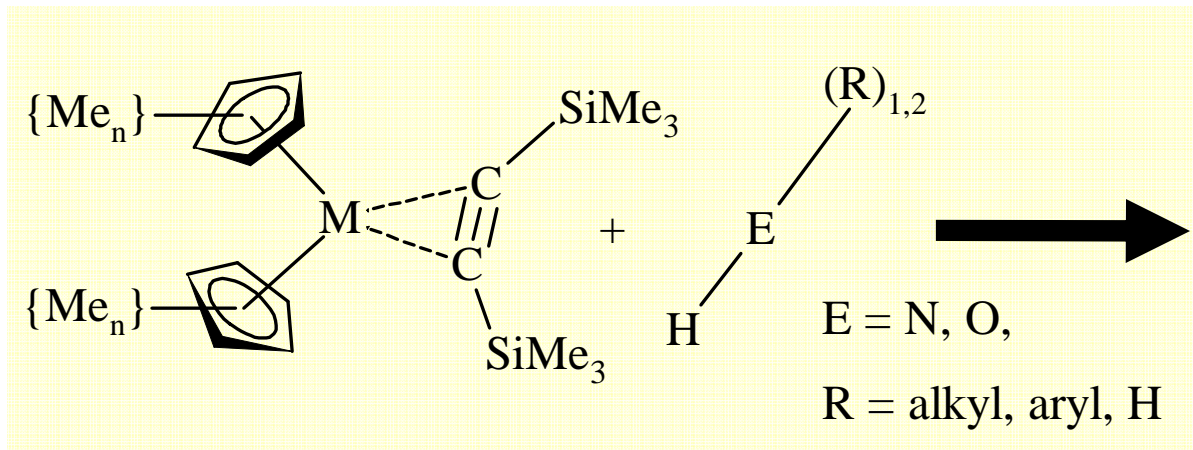
IM-12, Si/Ge = 4.5
póry: $9.5 \times 7.1 \text{ \AA}$ a $8.5 \times 5.5 \text{ \AA}$



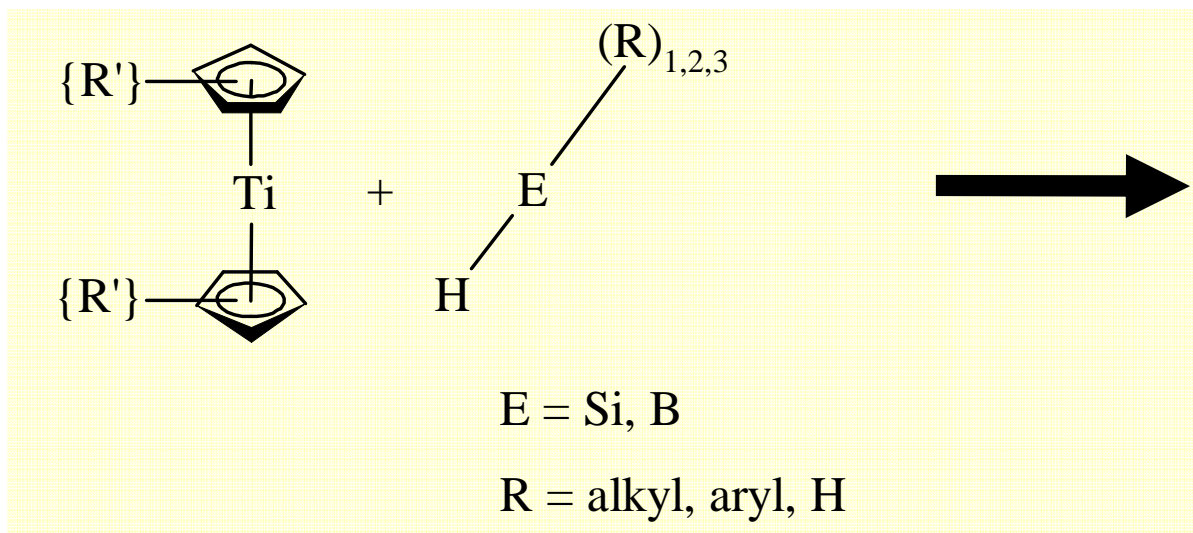
ITQ-15, Si/Ge = 8.5
póry: $10.0 \times 6.7 \text{ \AA}$ a $8.4 \times 5.8 \text{ \AA}$



Aktivace malých molekul metalocény



- trimerizace ethenu
- lineární dimerizace terminálních alkinů
- hydroaminace



- hydrosylilace
- hydroborace

Oddělení struktury a dynamiky v katalýze (Z. Sobalík)

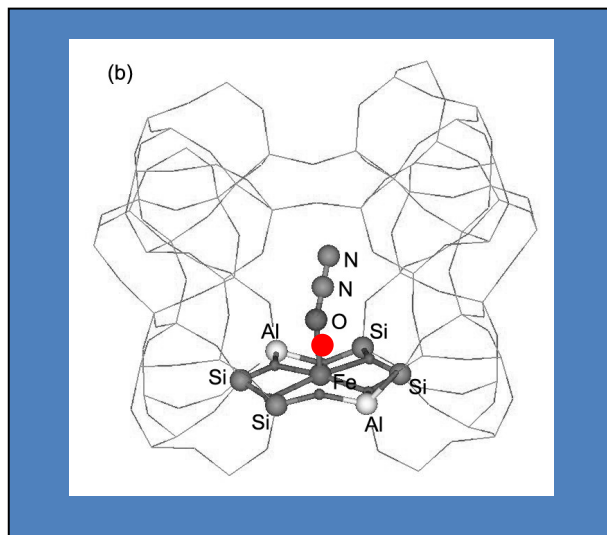
Směry výzkumu

- Syntéza a analýza struktury nano-materiálů
- Transportní a separační vlastnosti nanostruktur
- Vztah mezi strukturou a katalytickou aktivitou kovů/oxidů kovů v maticích
- Analýza dynamiky katalytických reakcí s in-situ katalyzátorů
- Vývoj procesů na nano-katalyzátorech

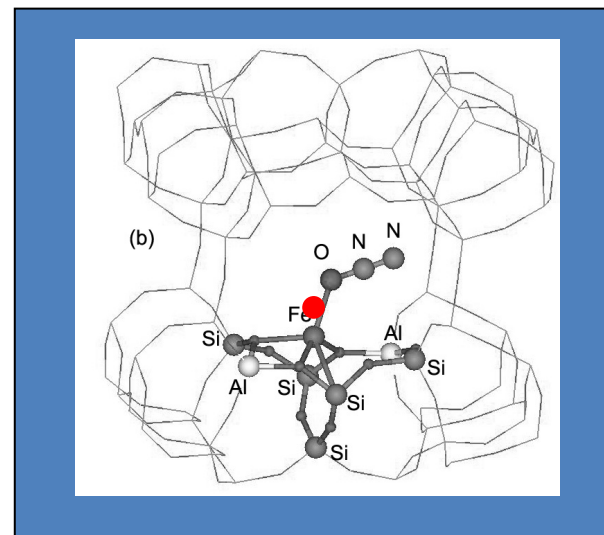
Katalytické aplikace

- např. odstraňování
- NO/NO₂ (NO_x)
 - Oxidu dusného
 - Amoniaků
 - Oxidu uhelnatého

Optimalizovaná struktura komplexu N_2O s Fe-FER



Fe(II) v poloze β



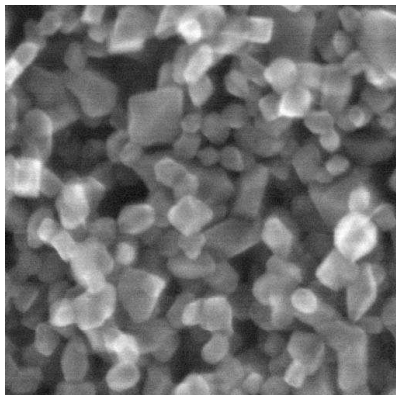
Fe(II) v poloze α

S. Sklenak, Z. Sobalík, et al.: *N_2O Decomposition on Iron Exchanged Ferrierite. A Combined Periodic DFT and Static IN-SITU FTIR Study, FEZA 2008*

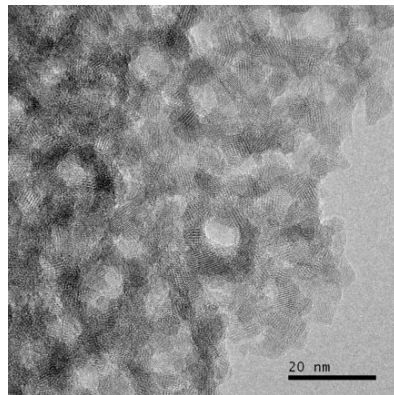
Oddělení elektrochemických materiálů (L. Kavan)

- Syntéza a vlastnosti materiálů na bázi nano-uhlíku (fullereny, nanotrubičky)
- Syntéza nanostrukturních TiO_2 materiálů pro solární články

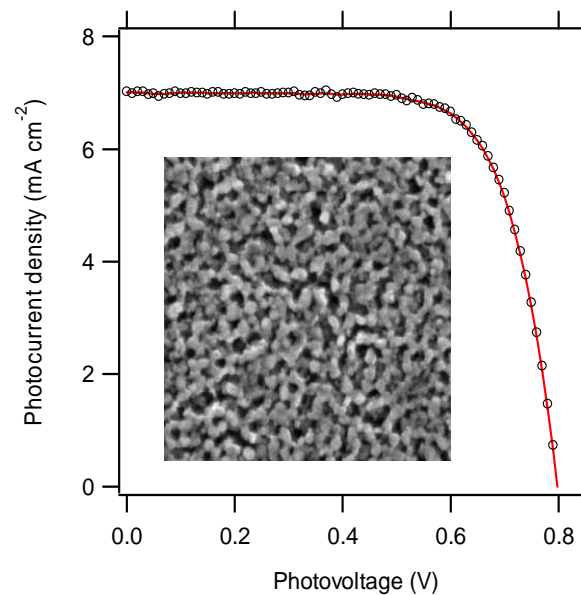
Syntéza TiO₂ pro solární články



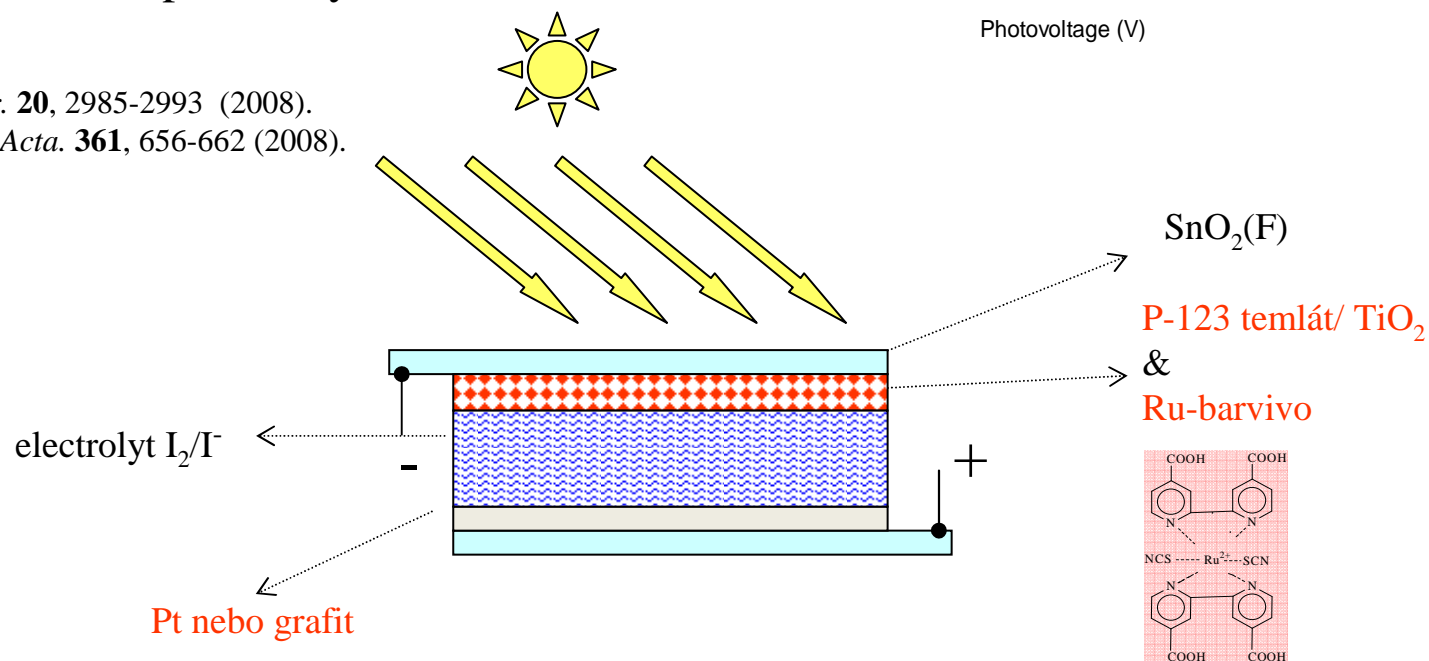
klasický film **2.21 %**



templátovaný film **4.63 %**



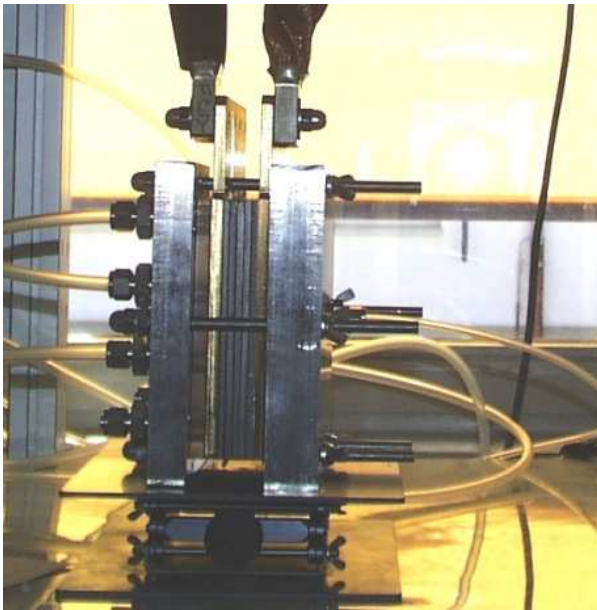
J. Procházka et al., *Chem.Mater.* **20**, 2985-2993 (2008).
 M. Zukalová et al., *Inorg.Chim.Acta.* **361**, 656-662 (2008).



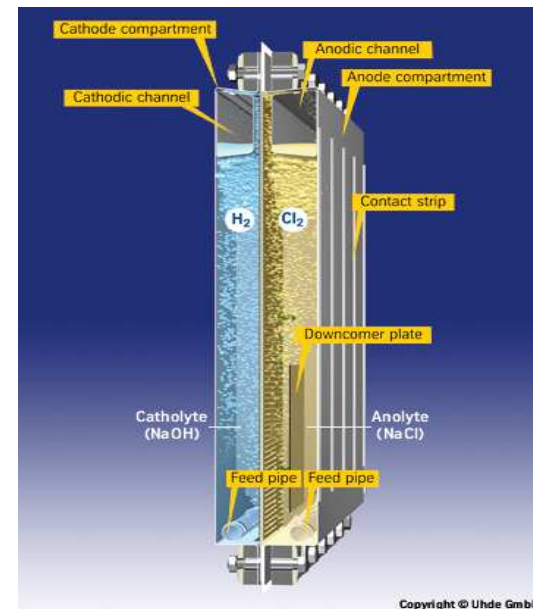
Oddělení elektrokatalýzy (Z. Samec)

- Syntéza a charakterizace nanokrystalických (elektro) katalyzátorů
- Selektivita elektrokatalýzy spojená s tvarem a částic a redox složením povrchu
- Molekulární katalýza redukce kyslíku na kapalných rozhraních

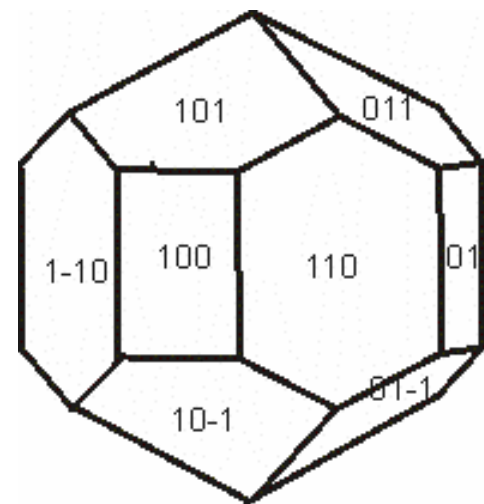
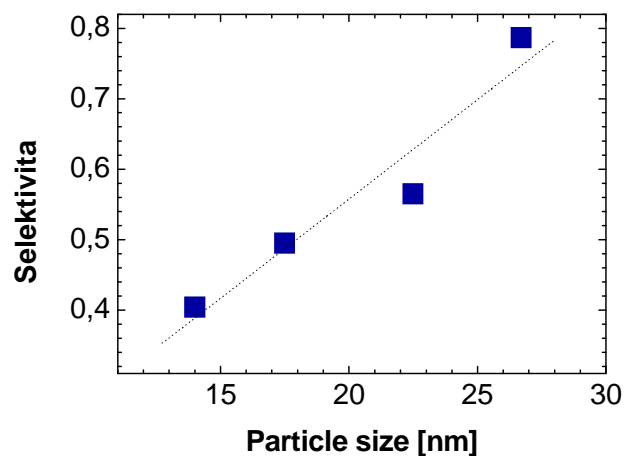
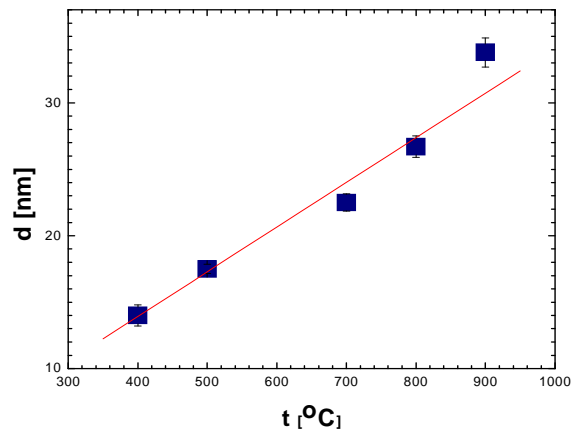
Palivové články



Technická elektrolýza



Tvarová selektivita RuO₂



Selektivita elektrokatalytického chování je řízena přítomností a četností krystalových hran na prismatické části nanokrystalů. Hrany oddělující plochy typu {110} a {100} jsou klíčové pro vylučování kyslíku.

Přehled uplatněných výsledků ÚFCHJH (2002-2007)

Typ dokumentu (zdroj: ARL/ASEP)	2002	2003	2004	2005	2006	2007	Součet
článek J	4	2	5	19	12	11	53
článek J imp.	188	190	177	155	150	155	1015
kap. v monografii cizojaz.	5	9	10	12	8	12	56
kap. v monografii čes.	2	0	0	0	0	7	9
konf. sb. cizojaz	0	1	0	3	1	0	5
konf. sb. čes.	0	0	0	1	1	0	2
monografie cizojaz.	0	0	1	0	0	0	1
monografie čes.	0	0	0	1	0	0	1
Patent	1	2	2	0	1	1	7
příspěvek ve sborníku cizojaz.	27	13	20	32	18	14	124
příspěvek ve sborníku čes.	1	9	14	16	5	15	60
Celkový součet	228	226	229	239	196	215	1333

Počet článků (zdroj SCOPUS)	175	198	187	197	178	168	1103
------------------------------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	-------------

Granty a kontrakty aktivní v roce 2008 (řešitel: L. Kavan, není-li uvedeno jinak)

TiO₂

- 2006-8: HETEROMOLMAT: Nanocrystalline Heterosupramolecular Materials for Optoelectronic Applications, STRP 516982; 1 850 k€
- 2006-8: OrgaPVnet: Stable and low cost organic solar cell technologies, FP6-E4-038889, 1 200 k€
- 2006-10: ORGANISOLAR New generation of organic based photovoltaic devices; (ESF&GACR) 525 k€
- 2006-9: COST D35: Molecular Engineering of Photonic Devices Based on Mesoscopic Oxide Layers, 1P05OC069 (MŠMT) 1 250 k€
- 2005-9: J. Jirkovský, NANOPIN: Výzkumné centrum Nanopovrchového inženýrství, 1M-0577; (MŠMT), 84 288 kKč
- 2006-10: S. Civiš, Heterogenní organické a hybridní nanokompozitní materiály pro solární články, KAN100500652, (AVČR), 27 493 kKč
- 2005-9: J. Jirkovský, Physico chemical characterization of titanium dioxide, COST OC104; (MŠMT) 1600 kKč

C

- 2005-9: Výzkumné centrum Nanotechnologií a materiálů pro nanoelektroniku, LC-510 (MŠMT), 69 469 kKč
- 2008-2012: Supramolekulární soustavy s uhlíkovými nanotubami, IAA400400804 (GAAVČR), 6370 kKč
- 2008-2012: BIODKOM = Bioaktivní a biokompatibilní povrchy (AVČR KAN 200100801), 98 966 kKč
- 2006-8: M. Kalbáč – juniorgrant: Spektroelektrochemická studie uhlíkových nanostruktur, B400400601 (GAAVČR), 988 kKč
- 2006-8: O. Frank – juniorgrant: Vznik a zachování fullerenu v horninách, 205/06/P348 (GAČR), 1006 kKč
- 2007-2010: M. Kalbáč- Elektronické interkace SWCNT a vodivých polymerů v kompozitech, DFG-GAČR, 2607

Průmyslové kontrakty

- 2005-8, HPL, SA 25 000 USD/yr
- 2007-8, Elmarco, Liberec, 300 kKč
- P. Janda, Škoda ÚJP, 150 kKč/yr

Celková externí dotace:

TiO₂ ~ 236 Mio Kč

C ~ 179 Mio Kč

Externí spolupráce v oddělení elektrochem. procesů (2008-2012)

Domácí

- Aqua-Contact Praha (Libor Novák)
- ATG Praha, s.r.o., Praha (František Peterka)
- Betonsan s.r.o., Sokolov (Jiří Dohnálek)
- Elmarco, Liberec (Lukáš Rubáček)
- FCH VUT Brno (Martin Weiter)
- FZÚ Praha (Jan Kočka, Ant. Fejfar, M. Nesládek)
- Generi Biotech, Hradec Králové (Martin Bunčec)
- Jihočeská universita Č. Budějovice (Lukáš Trantírek)
- Kloknerův ústav ČVUT Praha (Jiří Dohnálek)
- Lasselsberger Plzeň, a.s. (Jiří Sedmidubský)
- 3. Lékařská fakulta KU (Viktor Kočka)
- MFF UK, Praha (Jan Valenta)
- Precheza Přerov (Antonín Mlčoch)
- PřFUK (Jiří Vohlídal)
- PRO-EKO Ostrava (Václav Mokres)
- SOLARTEC, sro, Rožnov p. R. (Aleš Poruba)
- SYNPO, a.s., Pardubice (Štěpán Podzimek)
- TU Liberec (Petr Špatenka)
- Universita Pardubice (Jan Mistrík)
- US Spa sro, Dolní Dobrouč (Petr Kolář)
- ÚAnCH Řež (Jan Šubrt)
- ÚOCHB Praha (Miroslav Ledvina)
- ÚMCH Praha (Jiří Pflieger)
- ÚJV Řež (Jan Bálek)
- VŠCHT Praha (Josef Krýsa, Vladimír Král)
- ZENTIVA Praha (Jan Šotola)

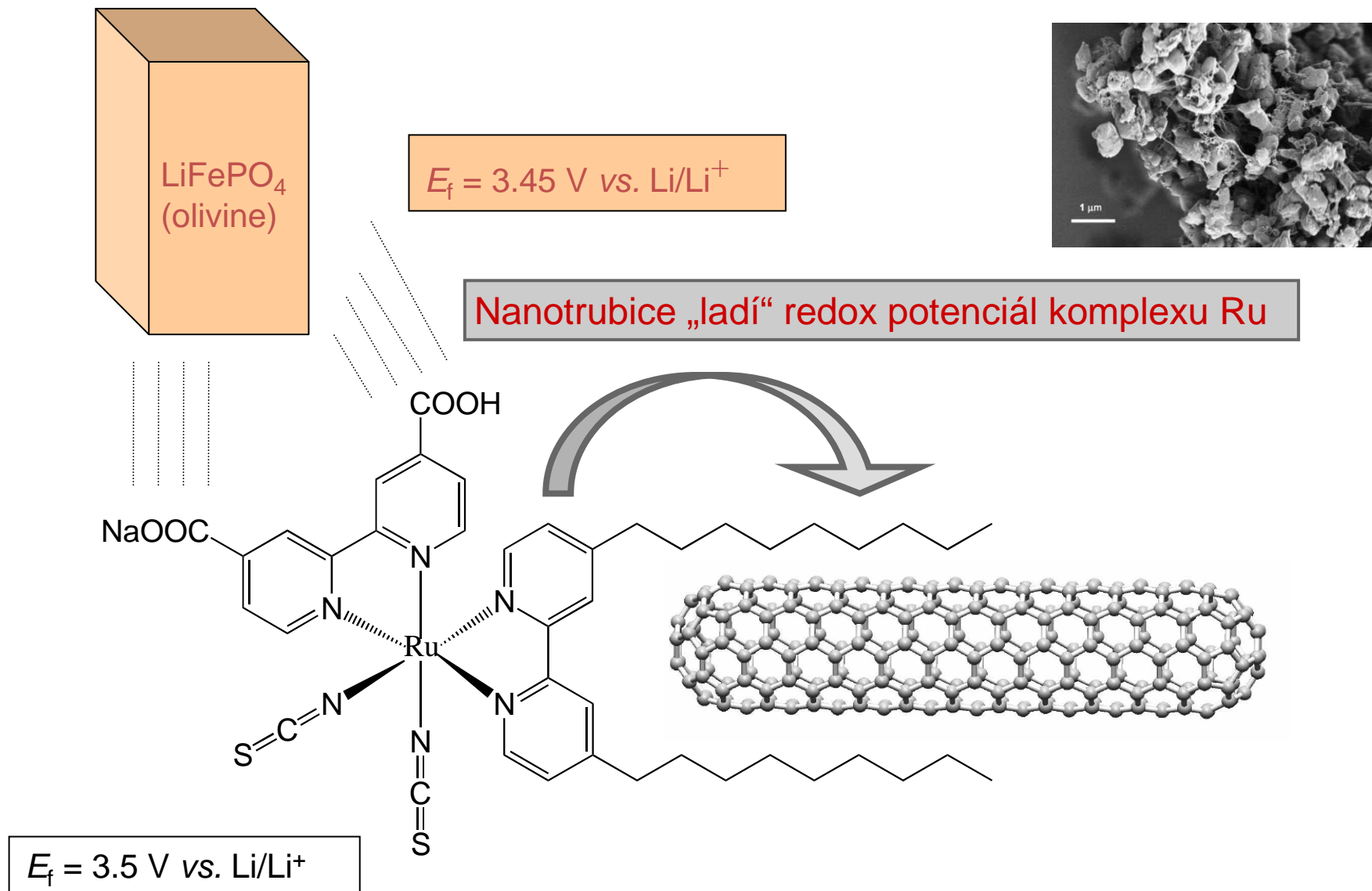
Zahraniční (mimo OrgaPVNet)

- Amba Services, Ltd. Maidenhead, UK (Richard Wells)
- Commissariat à l'Energie Atomique, Saclay (Carole Sentein)
- Ege University, Izmir (Siddik Icli)
- EPF-Lausanne (Michael Graetzel)
- Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems, Freiburg (Andreas Hinsch)
- High Power Lithium, SA, Lausanne (Ivan Exnar)
- Imperial College London (James Durrant)
- Interuniversity Micro-Electronic Centrum, Leuven (Jeff Poortmans)
- Institut Catala Quimica, Tarragona (Ramón Villar)
- Johannes Kepler Universität Linz (Serdar Sariciftci)
- Johnson Matthey Ltd., Reading (Chris Barnard)
- Konarka Austria Forschungs-u. Entwicklungs, GmbH (Franz Padinger)
- Konarka Technology AG (Keith Brooks)
- NCSR Demokritos, Athens (Polycarpos Falaras)
- Siemens, AG (Christoph Brabec)
- University College Dublin (Donald Fitzmaurice)
- Uni Basel (Edwin Constable)
- Uni Madrid (Tomas Torres)
- Uni Torino (Guido Viscardi)
- Uni Uppsala (Anders Hagfeldt)
- Uni Valencia (Emilio Palomares)
- Uni Vilnius (Vitautas Kažukaskas)

Oddělení teoretické chemie (J. Pittner)

- Vývoj multireferenčních metod spřažených klastrů
- Rozptyl elektronů na molekulách a teorie EELS spekter
- Studium povrchů, klastrů a nanostruktur, spektroskopické a magnetické vlastnosti
- Ab initio a DFT výpočty zeolitů
- Ab initio neadiabatická molekulová dynamika

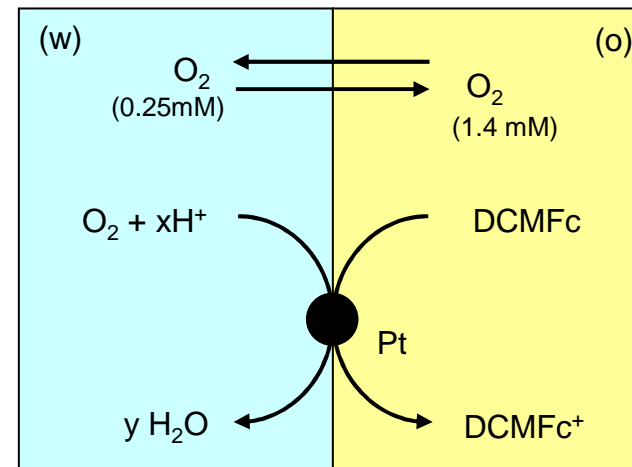
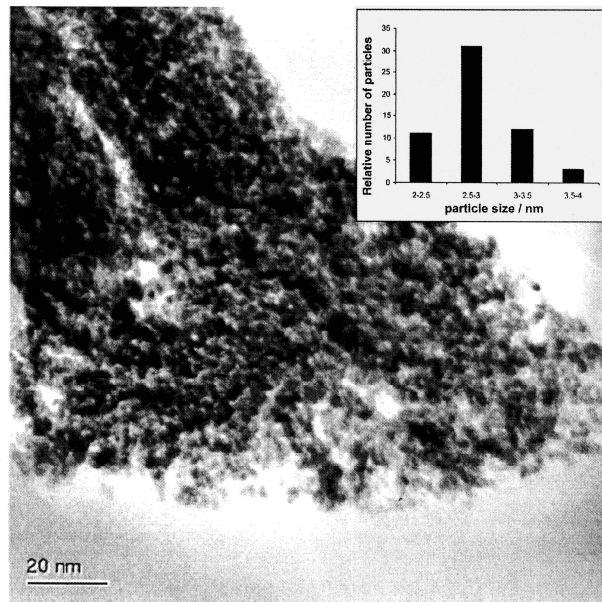
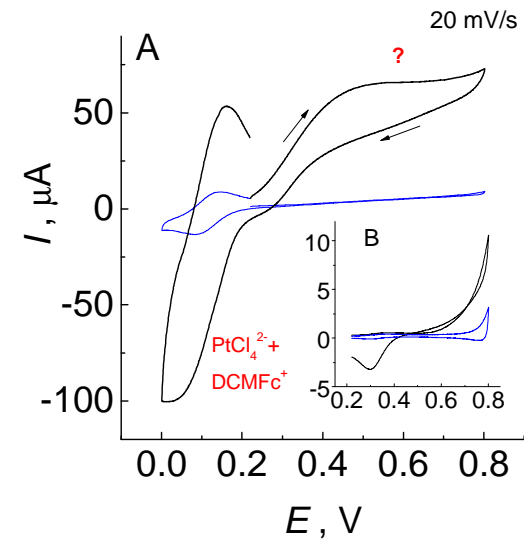
Uhlíkové nanotrubičky pro molekulární spoje



Elektrokatalýza redukce kyslíku na polarizovaných kapalných rozhraních

Elektrodepozice Pt 0.5 mM PtCl_4^{2-} , 50 mM dekametylferrocén (DCMFc)

PtCl_4^{2-} (voda) + $\text{Pt}_i(\sigma)$ + 2 DCMFc \rightarrow $\text{Pt}_{i+1}(\sigma)$ + 2 DCMFc⁺ + 4 Cl⁻
rozhraní voda-1,2 dichloretan



Určení pozice Al v skeletu ZSM-5 zeolitu na základě NMR a DFT

