



ÚSTAV CHEMICKÝCH PROCESŮ AV ČR, v. v. i.



VÝROČNÍ ZPRÁVA

O ČINNOSTI A HOSPODAŘENÍ ZA ROK 2012



Výroční zpráva

o činnosti a hospodaření

za rok

2012

Zpracovatel: Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i.
IČO: 67985858

Sídlo: Rozvojová 135/1
165 02 Praha 6 – Suchbát
tel.: 220 390 286
fax: 220 920 661
e-mail: icecas@icpf.cas.cz
<http://www.icpf.cas.cz>

Zřizovatel: Akademie věd ČR

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 20. června 2013

Radou pracoviště schválena dne: 25. června 2013

V Praze dne 28. června 2013



Obsah

I. Informace o složení orgánů veřejné výzkumné instituce a o jejich činnosti či o jejich změnách	4
Výchozí složení orgánů pracoviště	4
Ředitel, Rada pracoviště, Dozorčí rada	4
International Advisory Board	5
Vědecké útvary pracoviště	5
Změny ve složení orgánů	6
Organizační schéma pracoviště	6
Informace o činnosti orgánů	7
Ředitel	7
Rada pracoviště	7
Dozorčí rada	8
II. Informace o změnách zřizovací listiny	9
III. Hodnocení hlavní činnosti	9
Celková publikační produkce ústavu za rok 2012	9
Výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti za rok 2012	11
Výčet s anotacemi nejdůležitějších patentů, přihlášek patentů a PUV.....	26
Spolupráce s vysokými školami a vzdělávání středoškoláků	30
Bakalářské, magisterské a doktorské studijní programy	30
Sekundární vzdělávání (středoškolská výuka)	32
Vzdělávání veřejnosti	32
Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou	33
Společné projekty výzkumu a vývoje podpořené z veřejných prostředků	33
Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané na základě hospodářských smluv	34
Odborné expertizy zpracované v písemné formě pro státní orgány, instituce a podnikatelské subjekty	35
Zapojení do monitorovacích sítí	35
Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště	36
Projekty programů EU řešené na pracovišti v roce 2012	36
Mezinárodní projekty, které pracoviště řeší v rámci mezinárod. věd. programů.....	36

Aktuální meziústavní dvoustranné dohody	38
Akce s mezinárodní účastí, které ÚČHP v r. 2012 organizoval nebo v nich vystupoval jako spolupořadatel	39
Nejvýznamnější zahraniční vědci, kteří v r. 2012 navštívili ÚČHP	40
Nejvýznamnější popularizační aktivity ÚČHP	41
Domácí a zahraniční ocenění zaměstnanců ÚČHP	41
IV. Hodnocení další a jiné činnosti	42
V. Informace o opatřeních k odstranění nedostatků v hospodaření a zpráva, jak byla splněna opatření k odstranění nedostatků uložená v předchozím roce	42
VI. Finanční informace o skutečnostech, které jsou významné z hlediska posouzení hospodářského postavení instituce a mohou mít vliv na její vývoj	42
VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště	42
VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí	43
IX. Aktivity v oblasti pracovněprávních vztahů	44
Přílohy:	
Zpráva auditora o ověření účetní závěrky za rok 2012	49
Zpráva nezávislého auditora	51
Příloha	52
Rozvaha k 31.12.2012	53
Výkaz zisků a ztráty k 31.12.2012	56
Příloha k účetní závěrce k 31.12.2012	58



I. Informace o složení orgánů veřejné výzkumné instituce a o jejich činnosti či o jejich změnách

Výchozí složení orgánů pracoviště

Ředitel pracoviště:	Prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc. (do 31. 5. 2012) Ing. Miroslav Punčochář, CSc., DSc. (od 1. 6. 2012)
zástupce ředitele:	Ing. Olga Šolcová, CSc., DSc. (do 31. 5. 2012) Ing. Jan Sýkora, Ph.D. (od 1. 6. 2012)
vědecký tajemník:	Dr. Ing. Vladimír Církva

Rada pracoviště zvolena dne 12. 12. 2011 a 14. 12. 2011 ve složení:

předseda:	Dr. Ing. Vladimír Ždímal
místopředseda:	Ing. Karel Aim, CSc.
interní členové (ÚCHP):	Dr. Ing. Vladimír Církva Prof. Ing. Jiří Drahoš, DrSc., dr. h. c. Prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc. Ing. Miroslav Punčochář, CSc., DSc. Ing. Jan Sýkora, Ph.D. Ing. Olga Šolcová, CSc., DSc.
externí členové:	Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc. (FCHI VŠCHT Praha) Doc. Ing. Josef Koubek, CSc. (FCHT VŠCHT Praha) Prof. Ing. Miloš Marek, DrSc. (FCHI VŠCHT Praha) Prof. Ing. Karel Ulbrich, DrSc. (ÚMCH AV ČR) Prof. Ing. Kamil Wichterle, DrSc., dr. h. c. (VŠB -TU Ostrava)
tajemník:	Ing. Jan Storch, Ph.D. (ÚCHP)

Dozorčí rada jmenována dne 18. 4. 2007 a 3. 4. 2012 ve složení:

předseda:	Prof. Ing. Vladimír Mareček, DrSc. (AR AV ČR)
místopředseda:	Prof. Ing. František Kaštánek, DrSc. (ÚCHP)
členové:	Ing. Karel Bláha, CSc. (MŽP ČR) (do 30. 4. 2012) RNDr. Jan Hrušák, CSc. (ÚFCH JH AV ČR) Ing. Karel Klusáček, CSc. (Technologické centrum AV ČR) Prof. Ing. Vlastimil Růžička, CSc. (FÚ AV ČR)
tajemník:	Dr. Ing. Vladimír Církva (ÚCHP)



International Advisory Board

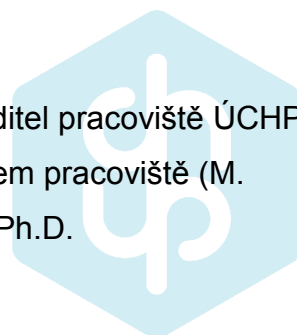
Prof. Ing. Vladimír Báleš, DrSc.	Slovak University of Technology, Bratislava, Slovakia
Prof. Liang-Shin Fan	Ohio State University, Columbus, USA
Prof. Anastasios J. Karabelas	Aristotle University of Thessaloniki, Greece
Prof. Valerii A. Kirillov	Boreskov Institute of Catalysis, Novosibirsk, Russia
Prof. Jan C. M. Marijnissen	Delft University of Technology, Netherlands
Prof. Alvin W. Nienow	University of Birmingham, United Kingdom
Dr. Akihiko Ouchi	National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Tsukuba, Japan
Prof. Ryszard Pohorecki	Warsaw University of Technology, Poland
Prof. Tapio O. Salmi	Åbo Akademi University, Åbo-Turku, Finland
Prof. Silvio Sicardi	Polytechnic University of Turin, Italy
Dr. Philippe Ungerer	French Institute of Petroleum, Rueil-Malmaison, France
Prof. Gabriel Wild	ENSIC CNRS, Nancy, France

Vědecké útvary pracoviště (Vedoucí)

1. Oddělení separačních procesů (Ing. Vladimír Jiříčný, CSc.)
2. Termodynamická laboratoř E. Hály (Ing. Karel Aim, CSc.)
3. Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství (Ing. Olga Šolcová, CSc., DSc.)
4. Oddělení vícefázových reaktorů (Doc. Ing. Marek Růžička, CSc., DSc.)
5. Oddělení organické syntézy a analytické chemie (Ing. Jan Sýkora, Ph.D.)
6. Laboratoř procesů ochrany prostředí (Ing. Miroslav Punčochář, CSc., DSc.) (do 31. 5. 2012),
(Dr. Ing. Vladimír Církva) (od 1. 6. 2012)
7. Oddělení aerosolových a laserových studií (Dr. Ing. Vladimír Ždímal)

Změny ve složení orgánů

Od 1. 6. 2012 byl jmenován předsedou AV ČR (J. Drahoš) nový ředitel pracoviště ÚČHP - Ing. Miroslav Punčochář, CSc., DSc. Od 1. 6. 2012 byl jmenován ředitelem pracoviště (M. Punčochář) nový zástupce ředitele pro vědu a výzkum - Ing. Jan Sýkora, Ph.D.

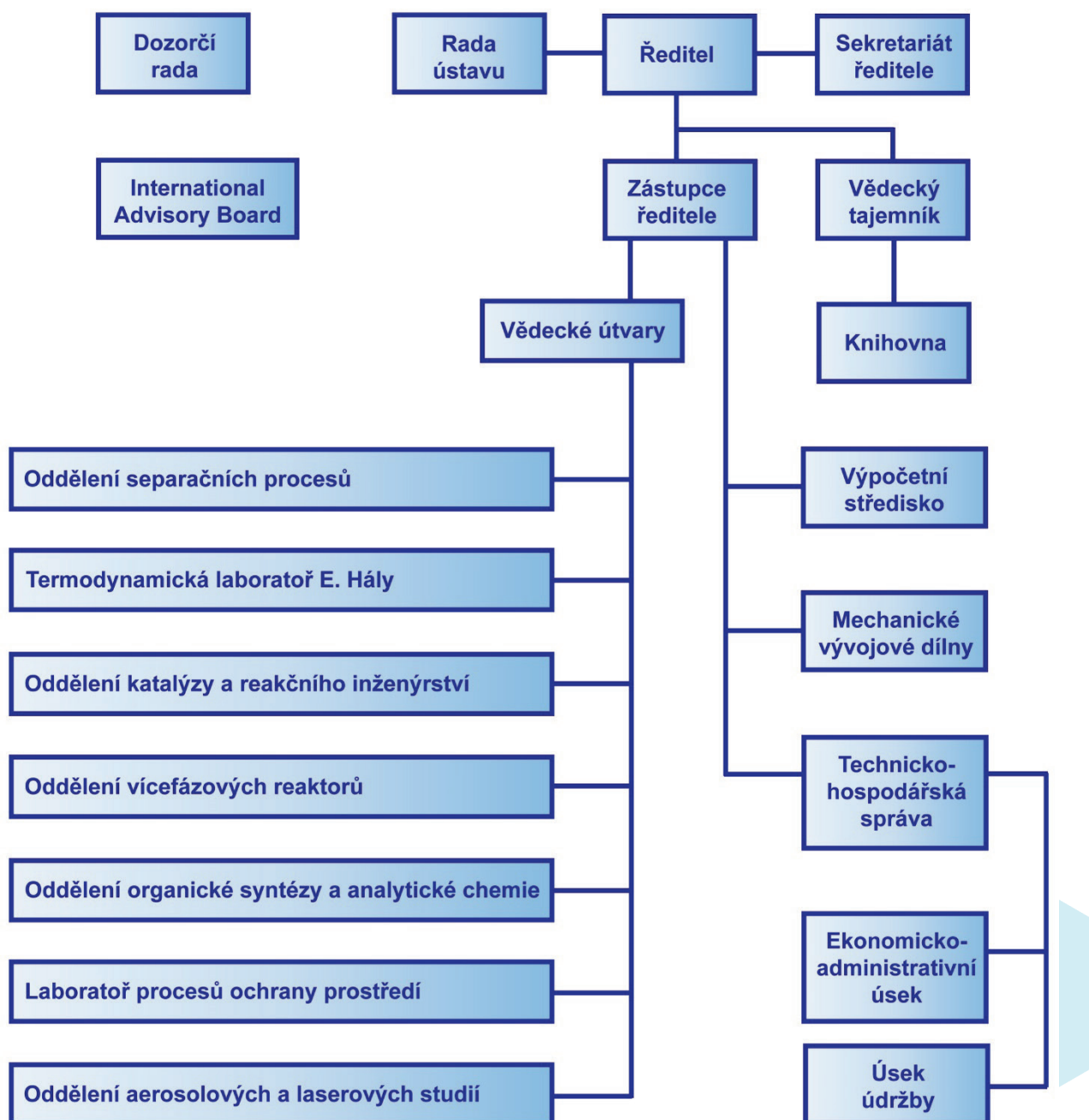


19. 1. 2012. byl zvolen na zasedání Rady pracoviště nový předseda Rady pracoviště - Dr. Ing. Vladimír Ždímal, a nový místopředseda Rady pracoviště - Ing. Karel Aim, CSc.

Od 3. 4. 2012 byl jmenován Akademickou radou AV ČR předseda Dozorčí rady ÚCHP - Prof. Ing. Vladimír Mareček, DrSc., a místopředseda Dozorčí rady ÚCHP - Prof. Ing. František Kaštánek, DrSc.

K dalším změnám ve složení orgánů ÚCHP v roce 2012 nedošlo.

Organizační schéma ÚCHP AV ČR, v. v. i.



Informace o činnosti orgánů

Ředitel

Na základě provedeného hodnocení vědecké a výzkumné činnosti týmů ÚCHP (31. 1. 2011) se ukázalo, že kvalita jejich činnosti je velmi dobrá a vyrovnaná. Výsledek hodnocení jednotlivých útvarů se promítl do návrhu (Akad. rada AV ČR) institucionálního financování na rok 2012 i roky následující. Je potěšitelné, že v nedávné době se věkový profil ústavu poněkud změnil vlivem zvýšeného počtu postgraduálních studentů a mladých vědeckých pracovníků. Vedení ústavu se i nadále bude cílevědomě starat o osobní růst jednotlivých členů týmů ve vědeckých odděleních.

V nedávném období byla nastolena personální politika, která vedla ke zlepšení věkové struktury vědeckých pracovníků ústavu, neboť vytvoření relativně mladého, motivovaného týmu s mezinárodními zkušenostmi a se schopností zahájit nové výzkumné programy je samozřejmě nezbytnou podmínkou pro budoucí vývoj ústavu. V následujícím období bude úsilí soustředěno na další zlepšování kvality vědecké a výzkumné činnosti, prohlubování mezinárodní spolupráce, zvláště v rámci projektů EU, a v neposlední řadě i na stabilizaci výzkumných týmů.

Dále byly zajišťovány následující agendy:

- řádné vedení účetnictví,
- inventarizace majetku,
- podpora ústavních projektů,
- investiční prostředky z fondu reprodukce majetku (FRM),
- konkurz na nákladné investice,
- nákladné stavební opravy,
- záležitosti areálu AV ČR Praha 6 - Lysolaje,
- přijímání nových pracovníků na základě konkurzních řízení.

Ředitel ústavu se pravidelně zúčastňoval zasedání Rady pracoviště a zasedání Dozorčí rady ÚCHP v případě, že byl k jednání přizván.

Předmětem pravidelných jednání Kolegia ředitele byly zejména: personální záležitosti, vědecko-výzkumná činnost, ekonomika ústavu a zahraniční cesty pracovníků ÚCHP. Ředitel na zasedáních informoval vedoucí vědeckých oddělení a operativní management ústavu o jednáních Akademického sněmu AV ČR a o úkolech vyplývajících z porad ředitelů ústavů s předsedou AV ČR, resp. s členy Akad. rady AV ČR. (V r. 2012 se uskutečnilo 16 zasedání Kolegia ředitele v termínech: 4.1., 25.1., 23.2., 7.3., 28.3., 18.4., 9.5., 6.6., 27.6., 8.8., 5.9., 26.9., 17.10., 7.11., 28.11. a 19.12. 2012.)

Bylo zajištěno plnění periodických kontrolních činností na úseku prevence rizik a ochrany zdraví při práci. Byly provedeny kontroly bezpečnosti práce a pořádku v areálu; vedoucím vědeckých oddělení bylo pravidelně ukládáno zabezpečování úklidu ve výzkumných laboratořích a poloprovozních halách.

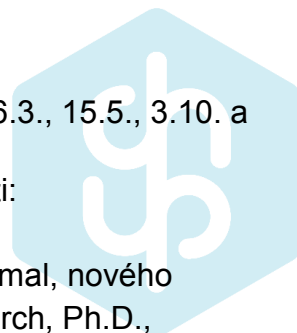
Rada pracoviště

V roce 2012 se uskutečnilo 5 zasedání Rady ÚCHP v termínech: 19.1., 26.3., 15.5., 3.10. a 11.12. 2012.

Rada pracoviště projednávala zejména následující významnější záležitosti:

- na svém 21. zasedání (19.1.):

- (a) zvolila nového předsedu Rady pracoviště - Dr. Ing. Vladimír Ždímal, nového místopředsedu - Ing. Karel Aim, CSc., a tajemníka - Ing. Jan Storch, Ph.D.,



- (b) zvolila výběrovou komisi na obsazení funkce ředitele ústavu na funkční období 2012-2017.
- na svém 22. zasedání (26.3.):
- (a) schválila návrh na finanční podporu ústavních projektů ÚČHP pro rok 2012,
 - (b) schválila návrh na pořízení investic z prostředků FRM ÚČHP na rok 2012,
 - (c) schválila dle předloženého návrhu rozpočet ÚČHP na rok 2012,
 - (d) navrhla na funkci ředitele pracoviště Ing. Miroslava Punčocháře, CSc., DSc.
- na svém 23. zasedání (15.5.):
- (a) schválila Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ÚČHP za rok 2011,
 - (b) vzala na vědomí nové složení Dozorčí rady ÚČHP na funkční období 2012-2017,
 - (c) schválila Spisový a skartační řád ÚČHP v předloženém znění.
- na svém 24. zasedání (3.10.):
- (a) schválila nové Složení Komise pro atestace vědeckých pracovníků,
 - (b) souhlasila s požadavkem na přidělení investičních prostředků na pořízení nákladného přístroje (LC/MS systém) v rámci konkurzu na rok 2013,
 - (c) navrhla K. Aima jako kandidáta do Akad. Rady AV ČR na funkční období 2013-2017, do Vědecké rady AV ČR na stejné období byli navrženi za externisty M. Marek a J. Koubek, za interního člena J. Hanika,
 - (d) schválila bez připomínek návrhy na zahraniční pracovní cesty v roce 2013 odesílané do výběrového řízení na ZhO AV ČR,
 - (e) schválila převedení výsledku hospodaření ÚČHP v roce 2011 do rezervního fondu.
- na svém 25. zasedání (11.12.):
- (a) schválila návrh na změnu Jednacího řádu Rady pracoviště (čl. 2, odst. 2), a to ve znění „Rada se schází k zasedání podle potřeby, nejméně však čtyřikrát za rok“.

Zápisy ze zasedání Rady ÚČHP byly průběžně zveřejňovány na interních webových stránkách ústavu i na ústavní nástěnce.

Dozorčí rada

V roce 2012 se uskutečnila 2 zasedání Dozorčí rady ÚČHP v termínech: 30.4. a 28.11. 2012.
Dozorčí rada ÚČHP:

- (a) byla seznámena se jmenováním nové Dozorčí rady ÚČHP (1.5.2012 - 30.4.2017), kterou schválila Akad. rada AV ČR na svém 41. zasedání (3.4.2012);
- (b) projednala a kladně se vyjádřila k Výroční zprávě o činnosti a hospodaření ústavu za rok 2011 a ocenila jak vědecké výsledky, tak její grafickou i věcnou podobu;
- (c) projednala a vzala na vědomí výrok auditora („Podle našeho názoru účetní závěrka podává věrný a poctivý obraz aktiv a pasiv Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i. k 31.12.2011, nákladů a výnosů a výsledku jejího hospodaření za rok končící 31.12.2011 v souladu s českými účetními předpisy“);
- (d) DR vzala na vědomí informaci o Rozpočtu ÚČHP AV ČR na rok 2012 na základě současného stavu projektů
- (e) vzala na vědomí Zprávu o činnosti Dozorčí rady ÚČHP za rok 2011;

- (f) vyjádřila se k odměně ředitele a jeho manažerským schopnostem, navrhla hodnocení ředitele jako vynikající;
- (g) projednala a udělila předchozí souhlas s uzavřením Kupní smlouvy s Hlavním městem Praha na prodej vodovodu pro veřejnou potřebu a k jeho údržbě a provozování;
- (h) projednala a udělila předchozí souhlas s uzavřením Smlouvy o zřízení věcného břemene s Hlavním městem Praha na zřízení věcného břemene vodovodu pro veřejnou potřebu a k jeho údržbě a provozování;
- (i) projednala a udělila předchozí souhlas s uzavřením Smlouvy o zřízení věcného břemene s ČEZ Distribuce na zřízení věcného břemene na zařízení distribuční elektrizační soustavy.

II. Informace o změnách zřizovací listiny

Nebyly navrženy žádné změny zřizovací listiny.

III. Hodnocení hlavní činnosti

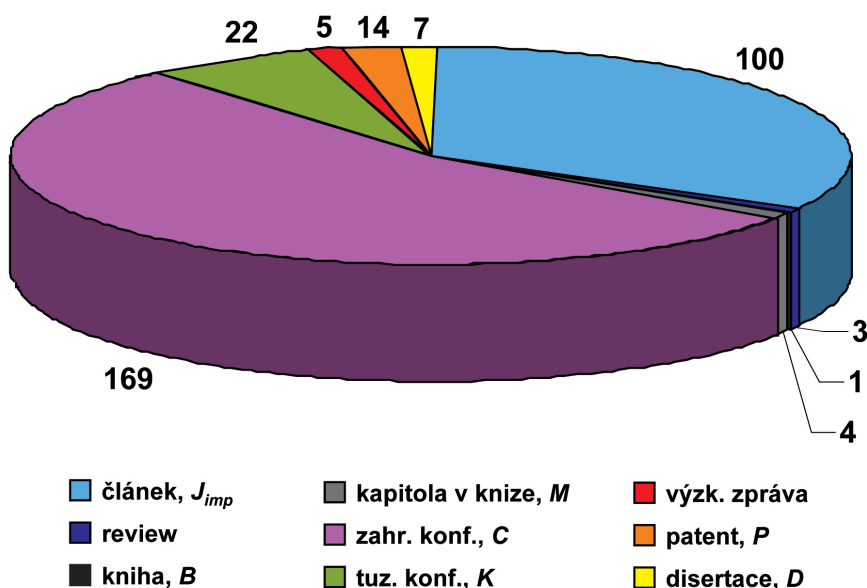
Předmětem hlavní činnosti ÚCHP je vědecký výzkum a vývoj v oblasti teorie chemických procesů, zejména v oborech chemického inženýrství, fyzikální chemie a bioinženýrství, zaměřený zvláště na chemickou a statistickou termodynamiku, separační procesy, katalýzu, reaktorové inženýrství, aplikovanou organokovovou chemii, vícefázové chemické reaktory a bioreaktory, biotechnologie a technologie procesů pro životní prostředí, dále pak na chemické reakce iniciované, resp. urychlované UV/Vis, laserovým, resp. mikrovlnným zářením, a na procesy tvorby a přeměn aerosolů.

Celková publikační produkce ústavu za rok 2012

Publikační produkce ÚCHP vytvořená v rámci hlavní činnosti čítá **100** původních prací (vesměs v impaktovaných mezinárodních časopisech), **3** přehledné články, **1** monografii, **4** kapitoly v knihách, **169** příspěvků na mezinárodních konferencích, **22** příspěvků na národních konferencích, **5** výzkumných zpráv, **14** udělených patentů a **7** obhájených disertačních prací.

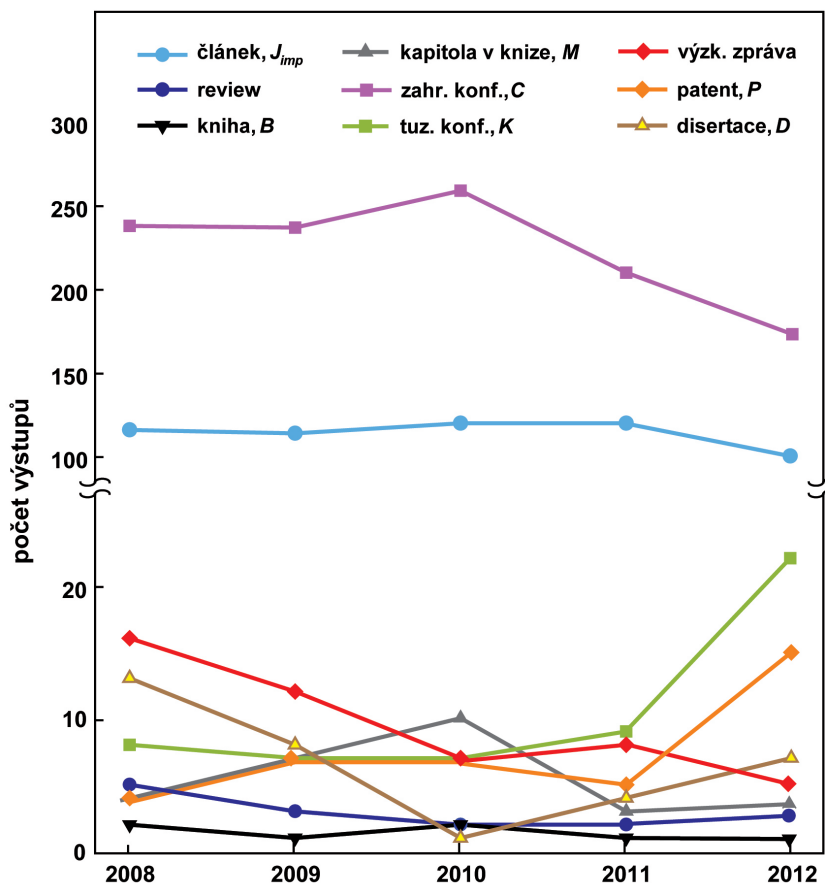


Publikační produkce 2012



Vývoj trendů v uplatněných výsledcích ÚCHP za posledních 5 let (období 2008 – 2012) ve struktuře postihující hlavní typy výsledků dodávaných do databáze RIV Informačního systému VaVal (původní články v impaktovaných časopisech J_{imp} , přehledné články - review, knihy B , kapitoly v knihách M , příspěvky na zahrani. konferencích C , příspěvky na tuzemských konferencích K , výzkumné zprávy, udělené patenty P a obhájené disertace D) ukazuje graf:

Vývoj publikační aktivity 2008 - 2012



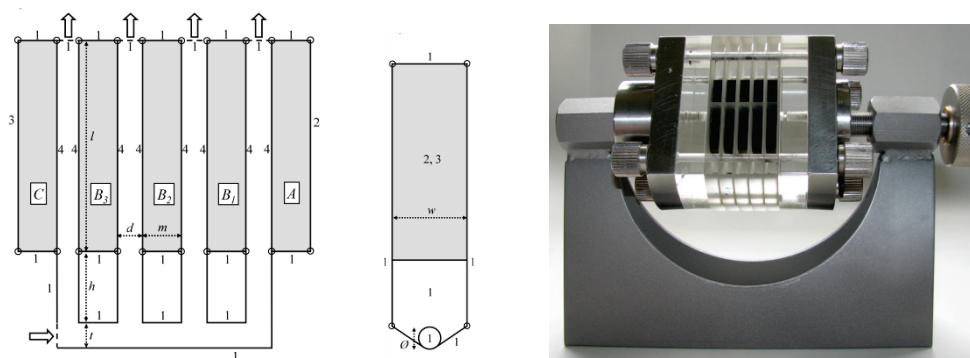
Výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti za rok 2012 (řazeno podle vědeckých oddělení)

Návrh mikroreaktoru pro elektrochemickou alkoxylation

(Ing. Jiří Křišťál, PhD.; kristal@icpf.cas.cz)

Křišťál J., Kodym R., Bouzeka K., Jiříčný V., Hanika J.: Electrochemical microreactor design for alkoxylation reactions-experiments and simulations. *Ind. Eng. Chem. Res.* 51,1515-1524(2012). (spolupráce: VŠCHT Praha)

Na základě matematických simulací jsme navrhli dva typy bipolárních elektrochemických mikroreaktorů pro alkoxylační reakce. Mikroreaktory byly experimentálně otestovány s důrazem na konverzi a selektivitu vybrané modelové reakce, kterou byla methoxylace 4-methylanisolu. Přestože je nezbytná další optimalizace navržených mikroreaktorů, dosažené výsledky jasně dokazují velký potenciál bipolárních mikroreaktorů pro intenzifikaci alkoxylačních reakcí.



Schematický model a fotografie bipolárního elektrochemického mikroreaktoru typu filter-press

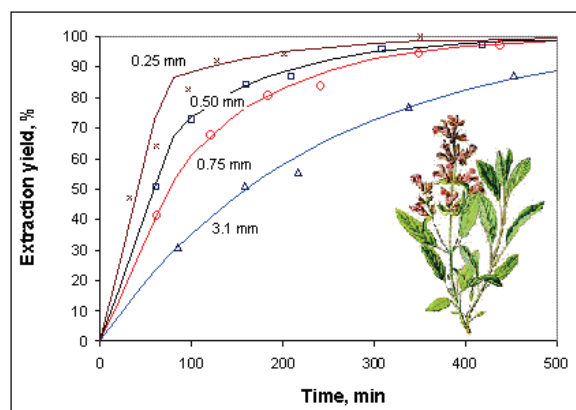
Kinetika extrakce silic stlačeným CO₂

(Ing. Helena Sovová, CSc.; sovova@icpf.cas.cz)

Sovová H.: Modeling the supercritical fluid extraction of essential oils from plant materials. *J. Chromatogr. A* 1250, 27-33 (2012).

Sovová H.: Apparent solubility of natural products extracted with near-critical carbon dioxide. *Am. J. Anal. Chem.* 3, 958-965 (2012).

Do matematického modelu rozlišujícího extrakci z otevřených a intaktních buněk rostliny byly vloženy nedávno publikované výsledky výzkumu souvislosti mezi morfologií extrahovaných aromatických rostlin a kinetikou jejich superkritické extrakce (Žižovič a kol.) a adsorpčních rovnováh látek extrahovaných z rostlin (Perrut a kol., del Valle a Urrego). Porovnáním s experimentálními daty byla prokázána platnost modelu pro kinetiku superkritické extrakce těkavých látek z rostlin a byly vyhodnoceny parametry modelu.



Vliv velikosti rozemletých částic šalvěje na rychlost extrakce oxidem uhličitým při tlaku 9 MPa a teplotě 50 °C. Symboly značí experimentální data (Reverchon a kol.), křivky výsledky modelu.

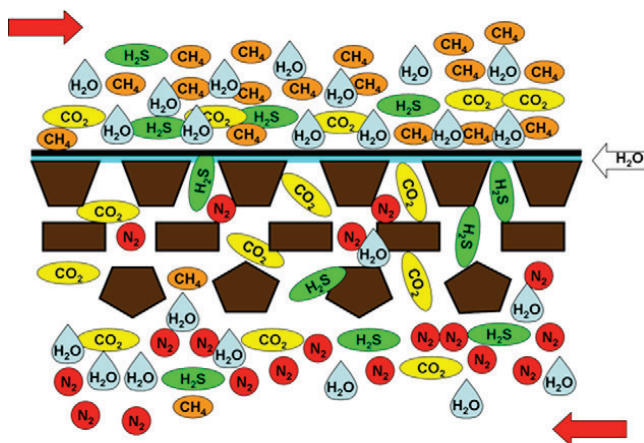
Efektivní dělení (obohacování) surového bioplynu o methan pomocí vodou zbotnalého polymerního gelu

(Ing. Pavel Izák, PhD; izak@icpf.cas.cz)

Kárászová M., Vejražka J., Veselý V., Friess K., Randová A., Hejtmánek V., Brabec L., Izák P.: A Water-Swollen Thin Film Composite Membrane for Effective Upgrading of Raw Biogas by Methane. *Sep. Purif. Technol.* 89, 212-216 (2012).

(spolupráce: VŠCHT Praha)

U námi vyvinuté jedнокrokové metody na čištění surového bioplynu používáme teplotu zbotnalé tenké hydrofilní kompozitní membrány pod bodem rosného bodu nástřikového proudu. Tím zajistíme kondenzaci vodní páry v surovém bioplynu obsažené na povrchu membrány a vytvoříme tím velmi tenkou selektivní vrstvu vody. Právě řádový rozdíl mezi rozpustnostními koeficienty CH_4 a CO_2 , H_2S ve vodě je zodpovědný za úspěšné obohacení surového bioplynu o methan.



Funkce vodní kondenzující membrány na tenké reverzně osmotické membráně

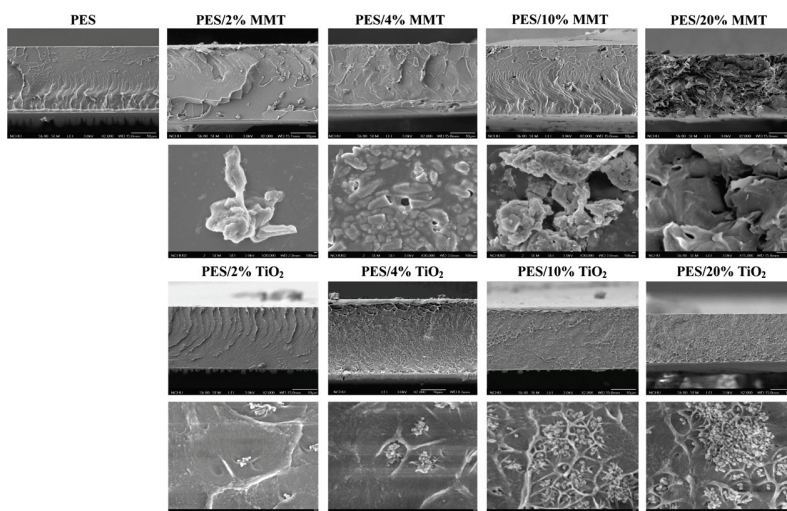
Membránová separace oxidu uhličitého

(Ing. Petr Uchytíl, CSc.; uchytil@icpf.cas.cz)

Liang C.-Y., Uchytíl P., Petrychkovych R., Lai Y.-C., Friess K., Sipek M., Reddy M.M., Suen S.-Y.: Preparation of PES (polyethersulfone)/MMT (Na-montmorillonite) and PES/ TiO_2 mixed matrix membranes for CO_2/CH_4 separation. *Sep. Purif. Technol.* 92, 57-63 (2012).

(spolupráce: National Chung Hsing University, Taichung, Tchaj-wan)

Byly připraveny, charakterizovány a testovány nové membrány, tj. polyethersulfon (PES) / MMT (Na-montmorillonit) a PES / TiO_2 , pro odstraňování oxidu uhličitého z plynných směsí.



SEM fotografie PES a PES / MMT membrán

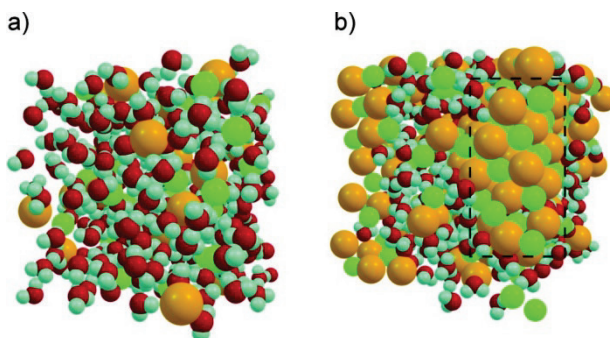
Molekulární simulace rozpustnosti elektrolytů ve vodě: Soli alkalických halogenidů a jejich směsi ve vodě a v kyselině chlorovodíkové

(Doc. Ing. Martin Lísal, DSc.; lisal@icpf.cas.cz)

Moučka F., Lísal M., Smith W.R.: Molecular Simulation of Aqueous Electrolyte Solubility. 3. Alkali-halide Salts and Their Mixtures in Water and in Hydrochloric Acid. *J. Phys. Chem. B* 116, 5468-5478 (2012).

(spolupráce: PŘF UJEP, Ústí n.L.; University of Ontario, Institute of Technology, ON, Kanada)

Metoda molekulárních počítačových simulací OEMC (Osmotic Ensemble Monte Carlo) pro přímý výpočet rozpustnosti elektrolytů ve vodě a pro výpočet jejich chemických potenciálů v závislosti na koncentraci byla rozšířena na systémy obsahující hydráty elektrolytů a směsné elektrolyty. Metoda využívá speciální semigrand-kanonický soubor, který provádí simulace roztoku za konstantního počtu molekul rozpouštědla, tlaku, teploty a specifikovaného celkového chemického potenciálu elektrolytu. Metodu jsme aplikovali na řadu alkalických halogenidů ve vodě a na vybrané příklady soustav zahrnující monohydrát LiCl, směsné roztoky elektrolytů zahrnující vodu a kyselinu chlorovodíkovou a invariantní body v těchto rozpouštědlech. Metoda využívá několik existujících modelů silových polí z literatury. Vypočtené výsledky kvalitativně dobře souhlasí s experimentálně pozorovanými trendy a vykazují obstojnou přesnost. Bylo zjištěno, že přesnost vypočtené rozpustnosti je ve vysoké míře závislá na použitém modelu silového pole.



Typická konfigurace získaná během OEMC simulací vodného roztoku NaCl

Fázové chování, interakce a struktura binárních směsí typu amin + iontová kapalina

(Ing. Magdalena Bendová, Ph.D.; bendova@icpf.cas.cz)

Jacquemin J., Bendová M., Sedláková Z., Holbrey J.D., Mullan C.L., Youngs T.G.A., Pison L., Wagner Z., Aim K., Costa Gomes M.F., Hardacre Ch.: Phase Behaviour, Interactions, and Structural Studies of (Amines + Ionic Liquids) Binary Mixtures. *Chem. Phys. Chem.* 13, 1825-1835 (2012).

(spolupráce: Queen's University of Belfast, UK)

Fázové chování, interakce a struktura čtyř binárních směsí typu amin + iontová kapalina byly komplexně studovány s použitím souboru experimentálních technik i počítačových simulací metodou molekulární dynamiky. Byly identifikovány typy diagramů fázových rovnováh a výsledky byly využity k ocenění predikčního potenciálu metod UNIFAC a COSMO-RS.

Kritická teplota a vlastnosti reálného plynu z poruchového viriálního rozvoje

(Prof. RNDr. Ivo Nezbeda, DrSc.; ivonez@icpf.cas.cz)

Krejčí J., Nezbeda I.: The Critical Temperature and Properties of Real Gas from Low Order Perturbed Virial Expansions. *Fluid Phase Equilib.* 314, 156-160 (2012).

(spolupráce: UJEP Ústí n. Labem)

Bylo ukázáno, že poruchový viriální rozvoj (rozvoj nízkého řádu v mocninách hustoty okolo krátkodosahového referenčního systému) dává ve srovnání s běžným viriálním rozvojem lepší výsledky pro odhad kritické teploty jednoduchých tekutin a termodynamiku reálného plynu v širokém rozmezí stavových podmínek; výsledky byly prezentovány pro pravoúhelníkový, Yukawův, Sutherlandův a Lennard-Jonesův interakční potenciál.

Rovnováha kapalina–pára (měření dat a jejich korelace)

(Ing. Ivan Wichterle, DrSc.; wichterle@icpf.cas.cz)

Pavlíček J., Bogdanić G., Wichterle I.: Vapour-Liquid and Chemical Equilibria in the Ethyl Ethanoate + Ethanol + Propyl Ethanoate + Propanol System Accompanied with Transesterification Reaction. *Fluid Phase Equilib.* 328, 61-68 (2012).

S použitím dynamického recirkulačního přístroje byly studovány fázové rovnováhy kapalina-pára kombinované s chemickou rovnováhou v kvarterní soustavě ethyl-ethanoát + ethanol + propyl-ethanoát + propanol, v níž probíhá transesterifikační reakce. Bylo zjištěno, že model NRTL s binárními parametry dává dobrou předpověď chování čtyřsložkového systému.



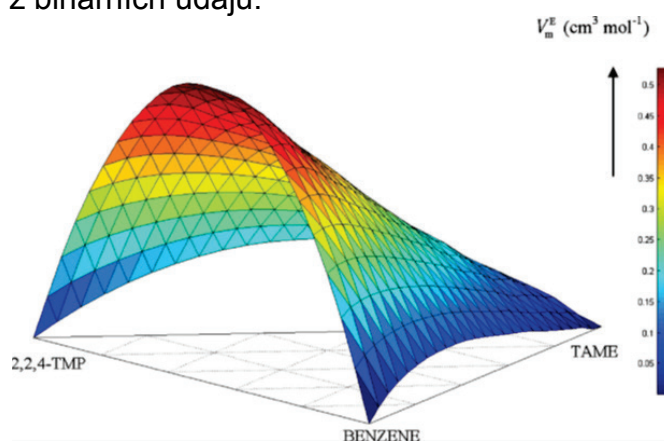
Celoskleněný cirkulační přístroj pro měření RKP

Stavové chování ternární a binárních soustav benzen + 2-methoxy-2-methylbutan + 2,2,4-trimethylpentan při teplotách od 298,15 K do 328,15 K

(Ing. Zuzana Sedláková, Ph.D.; sedlakova@icpf.cas.cz)

Houšková H., Morávková L., Sedláková Z., Boublík T., Kolská Z.: Volumetric Behavior of the Ternary System Benzene – 2-Methoxy-2-Methylbutane – 2,2,4-Trimethylpentane and All Binary Sub-Systems at Temperature Range (298.15 – 318.15 K). *Fluid Phase Equilib.* 337, 156-164 (2012).

Bylo proměřeno volumetrické chování ternární soustavy benzen + 2-methoxy-2-methylbutan (TAME) + 2,2,4-trimethylpentan (TMP) a jejich binárních sub-systémů v teplotním rozmezí od 298.15 do 318.15 K. Ve všech studovaných soustavách byly zjištěny kladné odchylky od ideálního chování. Pengova-Robinsonova stavová rovnice dobře předpovídá ternární molární objemy z binárních údajů.



Dodatkový molární objem V_m^E vs. molární zlomek jednotlivých složek (x_1 benzen + x_2 TAME + x_3 TMP) při $T = 298.15$ K



Transportní charakteristiky nových biokompatibilních materiálů

(Ing. Karel Soukup, Ph.D., soukup@icpf.cas.cz; Ing. Olga Šolcová, CSc.; solcova@icpf.cas.cz)
 Soukup K., Petráš D., Topka P., Slobodian P., Šolcová O.: Preparation and characterization of electrospun poly(p-phenylene oxide) membranes. *Catal. Today* 193, 165-171 (2012).
 (Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Centrum polymerních systémů)

Vyhodnocení transportních charakteristik biokompatibilních, klinicky využitelných materiálů, sestávajících z nanovláknenných membrán připravených technikou elektrostatického zvláknování a nanopráškovitých hydroxyapatitů. Transportní charakteristiky zkoumaných vzorků byly vyhodnoceny z měření v Grahamově difúzní cele a inverzní kapalinové chromatografie za využití modelu průměrného transportního póru.

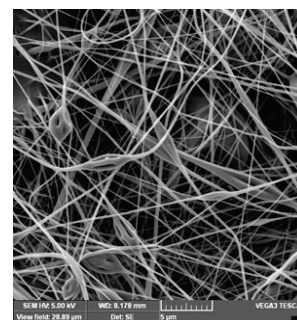
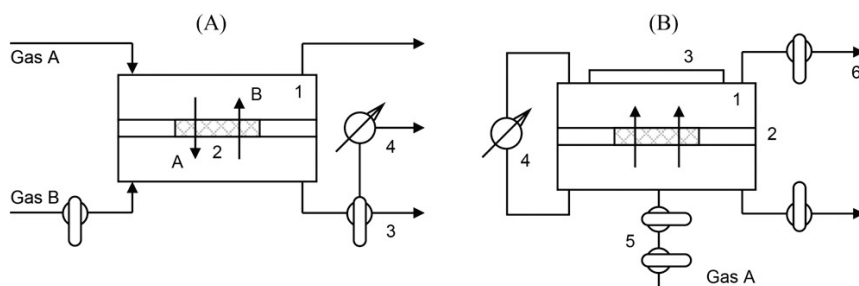


Schéma Grahamovy difúzní cely (A) a permeační cely (B)

Nanovláknenná membrána, SEM obrázek

Nekonvenční složení a příprava sulfidických hydrorafinačních katalyzátorů

(Mgr. Luděk Kaluža, Ph.D.; kaluza@icpf.cas.cz)
 Kaluža L., Gulková D., Vít Z., Zdražil M.: CoMo/ZrO₂ Hydrodesulfurization Catalysts Prepared by Chelating Agent Assisted Spreading. *Catal. Lett.* 142, 969-974 (2012).
 Palcheva R., Kaluža L., Spojakina A., Jiráťová K., Tyuliev G.: NiMo/γ-Al₂O₃ Catalysts from Ni Heteropolyoxomolybdate and Effect of Alumina Modification by B, Co, or Ni. *Chin. J. Catal.* 33, 952-961 (2012).

(spolupráce: Institute of Catalysis, Bulgarian Academy of Sciences, Sofie, Bulharsko)

Asistence chelátotvorného činidla kyseliny nitrilotrioctové (NTA) při přípravě nekonvenčních CoMo katalyzátorů nanosených na monoklinickém ZrO₂ zvyšuje hydrorafinační aktivitu v hydrodesulfurizaci (HDS) benzothiofenu v rozsahu 1.2-1.7. Molární poměr NTA/(Co+Mo) pro dosažení vysoké HDS aktivity byl 1/1. Neaktivnější katalyzátor CoMo/ZrO₂ byl připraven impregnací nosiče z roztoku vyrobeného rozpuštěním MoO₃, CoCO₃ a NTA ve vodě s následnou sulfidací bez předchozí kalcinace.



obr

Chemisorpční aparatura, AutoChem 2950 HP, Micromeritics



Pokroky v problematice down-stream procesů pro potenciální komerční produkci oleje z mikrořas

(Prof. Ing. František Kaštánek, DrSc.; kastanek@icpf.cas.cz)

Kaštánek P., Kaštánek F., Cepák V.: Recent advances in outdoor high-density cultivation of novelty micro-algae strain with high content of lipids. In: Proc. Symp. Next generation of biofuels from laboratory to industry, G5, CHISA Congress 2012, August 2012, Prague, Czech Republic (spolupráce: VŠCHT Praha, BÚ AV ČR, Ecofuel, s.r.o., Rabbit, a.s.)

Mikrořasy vzbuzují pozornost jako možné řešení řady velmi závažných problémů, zejména hrají významnou roli jako zdroj alternativních motorových paliv a jako potenciální zdroj mnoha bioaktivních látek zamýšlených zejména jako doplňků stravy (omega-3-mastné kyseliny, prekurozory vitaminů, apod.). Jednou z mnoha překážek pro využití řas produkujících lipidy je schopnost úspěšně extrahovat z řas jejich olej. Náklady na sklizeň řas jsou přitom rozhodujícím faktorem pro ekonomické užití řas, a to jak pro výrobu biopaliv, tak cenných chemických produktů.



Vzorek extrahovaného oleje z řasy *Chlorella vulgaris*

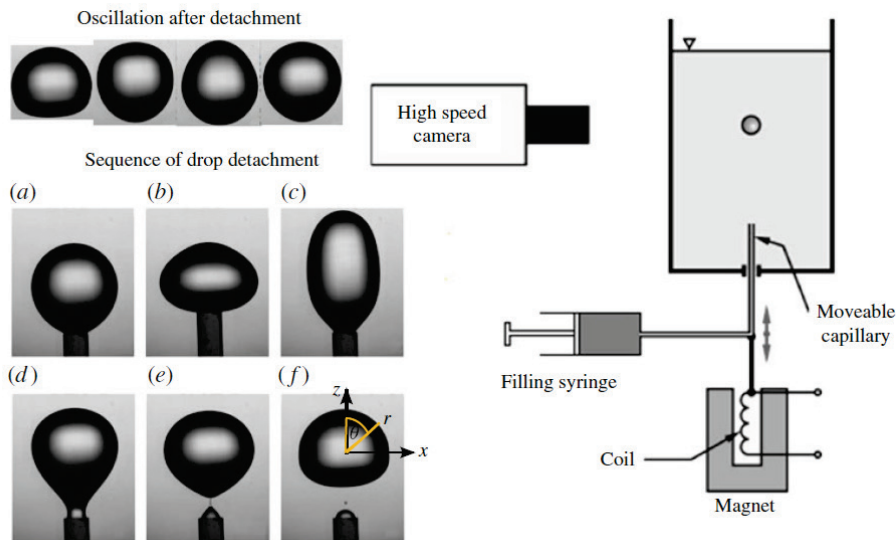
Tvarové oscilace olejových kapky stoupající ve vodě: Vliv povrchové kontaminace

(Ing. Jiří Vejražka, Ph.D.; vejrazka@icpf.cas.cz)

Abi Chebel N., Vejražka J., Masbernat O., Risso F.: Shape Oscillations of an Oil Drop Rising in Water : Effect of Surface Contamination. *J. Fluid Mech.* 702, 533-542 (2012).

(spolupráce: Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Francie)

Experimentálně jsme studovali vliv povrchové kontaminace na tvarové kmity kapek heptanu stoupajících ve vodě. Díky dekompozici tvaru do sférických harmonických funkcí byly změřeny frekvence a tlumení pro vlastní kmity druhého až pátého řádu. Ukázalo se, že frekvence vlastních kmitů nejsou ovlivněny kontaminací povrchu, zatímco rychlost tlumení je výrazně vyšší. Součinitel, který charakterizuje tento nárůst, nezávisí ani na rychlosti stoupání kapky, ani na její velikosti, mění se však řádem vlastního kmitu.



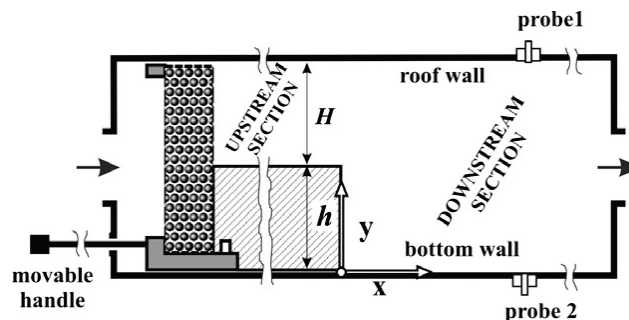
Experimentální aparatura a obrázky kapek

Tok v experimentálním kanále za náhlým rozšířením proměnné geometrie

(Ing. Jaroslav Tihon, CSc.; tihon@icpf.cas.cz)

Tihon J., Pěnkavová V., Havlica J., Šimčík M.: The Transitional Backward-Facing Step Flow in a Water Channel with Variable Expansion Geometry. *Exp. Therm. Fluid Sci.* 40, 112-125 (2012).

Proudění vody v experimentálním kanále s náhlým rozšířením bylo zkoumáno experimentálně a numericky pro střední hodnoty Reynoldsova čísla, různé geometrie rozšíření a různé tokové podmínky na vstupu (ustálený či pulzující tok). Elektrodiffúzní diagnostika toku byla použita k měření rozložení smykového napětí podél stěn experimentálního kanálu a též k detekci recirkulačních tokových oblastí. Výsledky 2D numerických simulací provedených v komerčním CFD programovacím prostředí FLUENT poskytly dodatečné informace o vlivu jednotlivých provozních parametrů na dosažený charakter proudění.



Experimentální kanál pro studium toku za náhlým rozšířením

Chytré RTD pro vícefázové systémy

(Ing. Miroslav Šimčík, PhD; simcik@icpf.cas.cz)

Šimčík M., Růžička M., Mota A., Teixeira J.A.: Smart RTD for Multiphase Flow Systems. *Chem. Eng. Res. Des.* 90, 1739-1749 (2012).

(spolupráce: Centre of Biological Engineering, University of Minho, Braga, Portugalsko)

Je prezentován poměrně nový koncept pro vyhodnocení rozložení dob prodlení uvnitř zařízení. V rámci nového přístupu označovaného jako SRTD je doba prodlení tekutiny považována za kvantitu pole a bilanční rovnice je formulována pro jeho časoprostorové distribuci v tokové doméně. V tomto příspěvku jsme se zabývali použitelností tohoto konceptu u vícefázových systémů. Na případě probublávané kolony byl výsledek simulace srovnáván pomocí koncepce RTD a SRTD s experimentem.

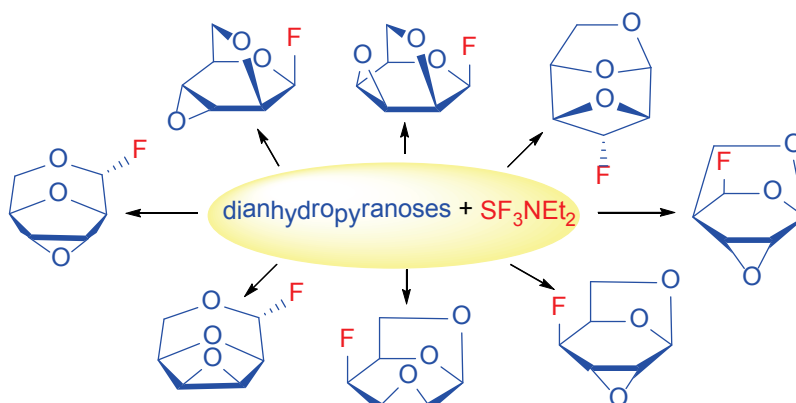
Skeletální přesmyky na základě reakcí 1,6:2,3- a 1,6:3,4-dianhydro- β -D-hexopyranos s diethylaminosulfurtrifluoridem (DAST)

(Mgr. Jindřich Karban, PhD; karban@icpf.cas.cz)

Karban J., Císařová I., Strašák T., Červenková Šťastná L., Sýkora J.: Skeletal rearrangements resulting from reactions of 1,6:2,3- and 1,6:3,4-dianhydro- β -D-hexopyranoses with diethylaminosulphur trifluoride. *Org. Biomol. Chem.* 10, 394-403 (2012).

(spolupráce: PřF, Univerzita Karlova v Praze)

Byla připravena série osmi 1,6:2,3- a 1,6:3,4-dianhydro- β -D-hexopyranos a podrobena reakci s fluoračním činidlem DAST. 1,6:3,4-Dianhydropyranosy reagovaly výlučně skeletálními přesmyky, při kterých migruje kyslík tetrahydropyranového cyklu (tj. edukty *D-alto* a *D-talo* konfigurace) nebo kyslík 1,6-anhydromůstku (*D-allo*, *D-galakto*). 1,6:2,3-Dianhydropyranosy reagovaly převážně nukleofilní substitucí na C-4 buď s retencí (*D-talo*, *D-gulo*) nebo s inverzí konfigurace (*D-manno*) nebo migrací uhlíku C-6 (*D-allo*). 1,6:2,3-Dianhydropyranosy dále poskytly také minoritní produkty vznikající migrací tetrahydropyranového kyslíku (*D-gulo*), oxiranového kyslíku (*D-manno*) nebo nukleofilní substitucí s retencí konfigurace (rovněž *D-manno*). Struktura většiny produktů byla potvrzena X-ray krystalografií.



Fluorace 1,6:2,3- a 1,6:3,4-dianhydro- β -D-hexopyranos pomocí DAST

Syntéza karbosilanových metalodendrimerů s koncovými titanocen dichloridovými skupinami

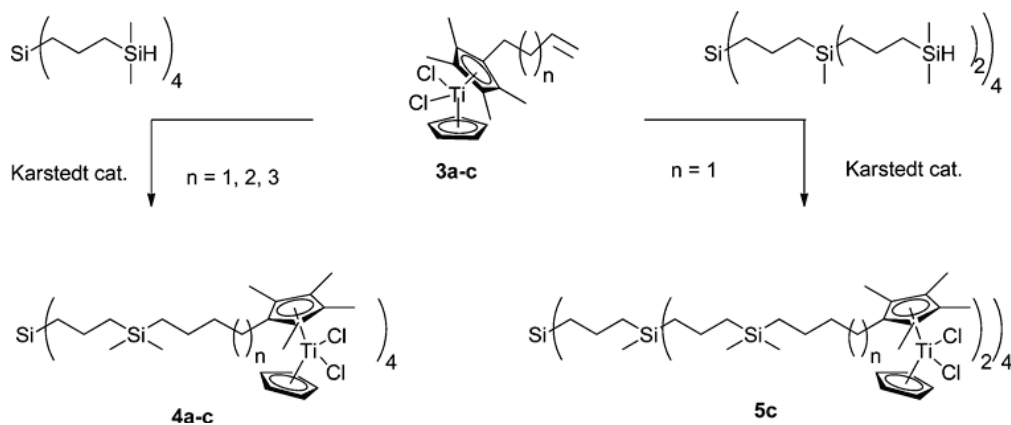
(Doc. Ing. Jan Čermák, CSc.; cermak@icpf.cas.cz)

Krupková A., Čermák J.: Carbosilane metallodendrimers with cyclopentadienyldichlorotitanium(IV) end groups. *J. Inorg. Organomet. Polym.*, 22, 470-477 (2012).

Strašák T., Čermák J., Sýkora J., Horský J., Walterová Z., Jaroschik F., Harakat D.: Carbosilane Metallodendrimers with Titanocene Dichloride End Groups. *Organometallics* 31, 6779-6786 (2012).

(spolupráce: ÚMCH AV ČR; Institut de Chimie Moléculaire de Reims, Francie)

S použitím hydrosilylace jako uzavírající reakce byly připraveny karbosilanové dendrimery obsahující koncové skupiny se substituovanými titanocen dichloridy. Bylo postupováno podle dvou navzájem se doplňujících cest: hydrosilylace omega-alkenylsubstituovaných titanocen dichloridových komplexů dendrimery terminovanými Si-H vazbami a hydrosilylace vinylterminovaných dendritickým materiálů pomocí 3-(dimethylsilyl)propyl substituovaného titanocen dichloridu. První postup poskytl dendrimery první generace se čtyřmi koncovými jednotkami a druhé generace s osmi koncovými jednotkami. Druhým postupem vznikly dendritické klíny a dendrimery až do druhé generace s šestnácti periferními titanocen dichloridovými jednotkami a molekulovou hmotností 7070 Da. Dendritické materiály byly čištěny GPC a charakterizovány MALDI-TOF hmotnostní spektrometrií a ESI-TOF hmotnostní spektrometrií (metalodendrimery) a také multinukleární NMR.



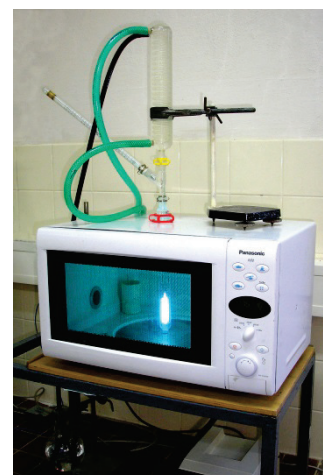
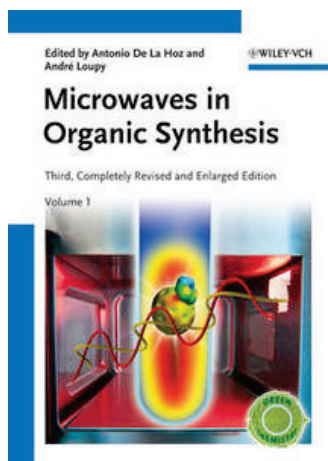
Syntéza metalodendrimerů pomocí inverzní hydrosilylace

Mikrovlny ve fotochemii a fotokatalýze – celkový přehled

(Dr. Ing. Vladimír Církva; cirkva@icpf.cas.cz)

Církva V.: Microwaves in Photochemistry and Photocatalysis. V knize: *Microwaves in Organic Synthesis*. (de la Hoz, A. - Loupy, A., Ed.), kapitola 14, str. 563-605, Wiley-VCH Verlag, Weinheim 2012.

Spojená aktivace fotochemických a fotokatalytických reakcí pomocí dvou různých druhů záření, mikrovlnného a UV/Vis, je součástí nového oboru pojmenovaného mikrovlnná fotochemie a fotokatalýza. Takové spojení může mít synergický efekt na reakci či alespoň zvýšit součet individuálních efektů. Tento obor bývá spojován s bezelektrodovými výbojkami (EDL), které jako nový světelný zdroj generují v mikrovlnném poli UV/Vis záření. Kapitola je zaměřena na základní principy mikrovlnné fotochemie a fotokatalýzy, tj. generování UV/Vis výboje v EDL (teorie mikrovlnných výbojů, výroba EDL, příprava tenkých filmů TiO_2 na EDL, spektrální charakteristiky EDL a testování výkonnosti EDL). Rovněž byly popsány různé typy mikrovlnných fotochemických a fotokatalytických reaktorů (vsádkový s externím a interním zdrojem světla, kruhový a válcový průtokový) s různým uspořádáním. Koncepce mikrovlnné fotochemie a fotokatalýzy jako důležitého nástroje syntetické chemie a materiálové vědy je v publikacích přehledně uvedena v několika tabulkách a schématech.



Kniha, bezelektrodové výbojky a experimentální uspořádání pro mikrovlnnou fotochemii a fotokatalýzu

Zařízení pro fluidní zplyňování tuhých paliv

(Ing. Michael Pohořelý, PhD; pohorely@icpf.cas.cz)

Pohořelý M., Jeremiáš M., Kameníková P., Skoblja S., Svoboda K., Punčochář M.: Zplyňování biomasy. *Chem. Listy* 106, 264-274 (2012).

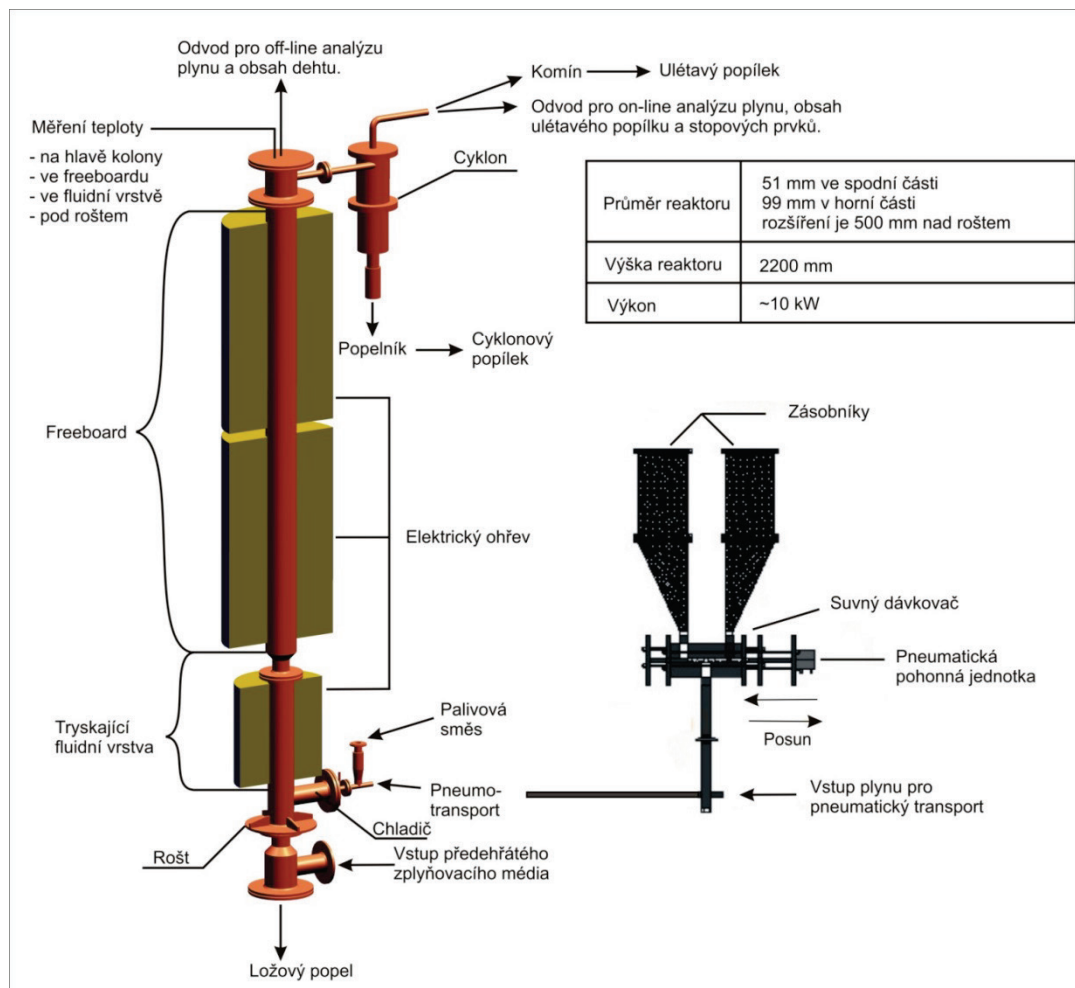


Svoboda K., Pohořelý M., Jeremiáš M., Kameníková P., Hartman M., Skoblja S., Šyc M.: Fluidized bed gasification of coal-oil and coal-water-oil slurries by oxygen-steam and oxygen-CO₂ mixtures. *Fuel Process. Technol.* 95, 16-26 (2012).

Hartman M., Svoboda K., Pohořelý M., Šyc M.: Otěr minerálních katalyzátorů ve fluidním zplyňovacím reaktoru. *Chem. Listy* 106, 844-846 (2012).

(spolupráce: VŠCHT Praha)

Výzkum probíhá na fluidním zplyňovacím zařízení pro různá tuhá, či kapalná paliva, které umožňuje sledování vlivu typu paliva a operačních podmínek na stabilitu procesu zplyňování a kvalitu produkovaného plynu. Zařízení je vhodné zejména pro zkoumání chemizmu termochemické transformace zrnitého ale i kapalného uhlíkatého materiálu na výhřevný generátorový plyn obsahující jako hlavní palivové složky CO, H₂, CH₄ a C_xH_y v laboratorním měřítku. Zařízení lze využít i v případech, kdy je plánována stavba fluidní zplyňovací jednotky v průmyslovém měřítku a je potřeba předem otestovat různé operační podmínky, na jejichž základě je možno navrhnout konstrukci daného zařízení. Dále je možné zařízení využít při uvažované změně paliva v již existujících jednotkách pro testování konkrétní palivové směsi za daných operačních podmínek.



Fluidní zplyňovací generátor

Zplyňování dřevěných peletek a štěpků inovačním způsobem v bezroštovém zařízení s pomalu se sunoucí vrstvou směrem nahoru

(Doc. Ing. Karel Svoboda, CSc.; svoboda@icpf.cas.cz)

Šulc J., Štojd J., Richter M., Popelka J., Svoboda K., Smetana J., Vacek J., Skoblja S., Buryan P.: Biomass Waste Gasification - Can Be the Two Stage Process Suitable for Tar Reduction and Power Generation?. *Waste Management* 32, 692-700 (2012).

Svoboda K., Pohořelý M., Jeremiáš M., Kameníková P., Hartman M., Skoblia S., Šyc M.: Fluidized bed gasification of coal-oil and coal-water-oil slurries by oxygen-steam and oxygen-CO₂ mixtures. *Fuel Process. Technol.*, 95, 16-26 (2012).

(spolupráce: VŠCHT Praha, UJEP Ústí n. Labem; D.S.K., s.r.o., Teplice)

Byla vyvinuta inovační zplyňovací technologická metoda pro zplyňování dřevěných pelet, směsných pelet a upravené dřevěné štěpky. Nová patentovaná metoda je založena na pomalém vzestupném pohybu pelet/štěpky prostřednictvím vertikálního šnekového dopravníku, využití odpadního tepla, na rozšířené sekci v horní části válcovitého reaktoru a stupňovitým přívodem vzduchu pro dosažení delších časů prodloužení plynu a uhlíkatého zbytku v reaktoru a pro dosažení teplot nad 1000 °C, potřebných pro dosažení vyššího stupně zplynění uhlíkatého zbytku a pro termickou destrukci dehtových sloučenin v produkovaném plynu. Výsledný vyrobený plyn má nízkou koncentraci dehtu a po odstranění prachu a přebytečné vlhkosti (případně též amoniaku) může být využit k pohonu plynového spalovacího motoru. Separované částice nezreagovaného uhlíkatého koksíku mohou sloužit buď k výrobě směsných peletek (dřevo-uhlík) nebo k přímému využití jako tzv. biochar v zemědělství při zúrodňování půd.



Dvoustupňové uspořádání zplyňovacího reaktoru v testovacím režimu

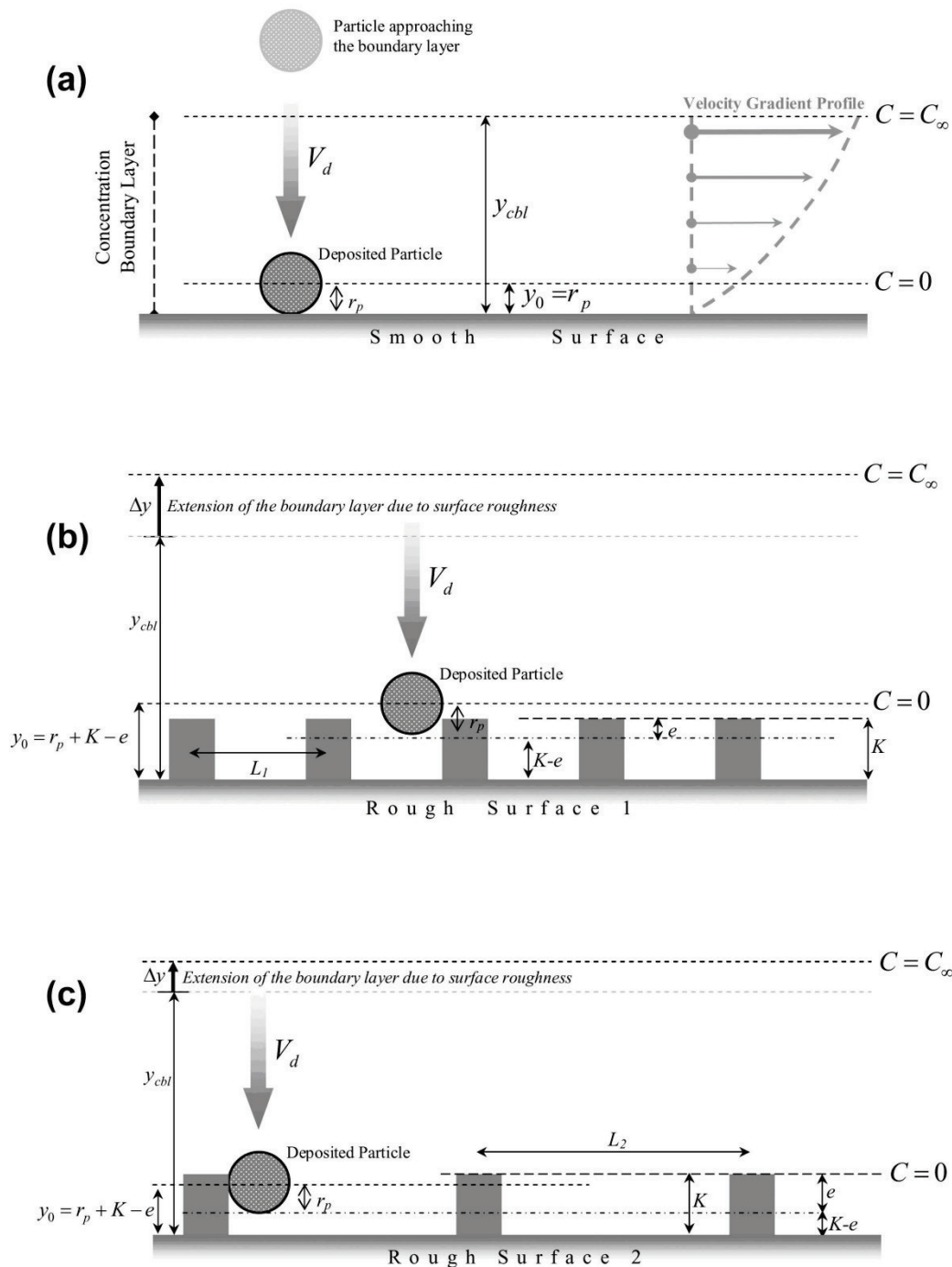
Modelování depozice aerosolových částic na hrubé povrchy

(Ing. Jiří Smolík, CSc.; smolik@icpf.cas.cz)

Hussein T., Smolík J., Kerminen V.-M., Kulmala M.: Modeling Dry Deposition of Aerosol Particles onto Rough Surfaces. *Aerosol Sci. Tech.* 46, 44-59 (2012).

(spolupráce: University of Jordan, Jordánsko; University of Helsinki, Finsko; Finnish Meteorological Institute, Finsko)

Suchá depozice částic, je primární mechanismus, jakým jsou částice transportovány z plynu k povrchům a následně deponovány. Předpověď depoziční rychlosti je tak potřeba jak v environmentálních, tak inženýrských procesech. Vedle charakteristického toku plynu u povrchu a vlastnostech aerosolových částic závisí depozice zejména na vlastnostech povrchů. Dosaďadní modely charakterizují hrubost povrchů pouze jedním parametrem, výškou výčnělků. V této práci jsme zavedli nový přístup jak charakterizovat hrubost povrchů pomocí hybridního parametru kombinujícího výšku výčnělků se vzdáleností mezi nimi. Nový přístup umožňuje přesněji předpovědět depoziční rychlost v širokém rozsahu velikostí aerosolových částic.



Schema deposice částice přes koncentrační mezní vrstvu: (a) hladký povrch, (b) hrubý povrch s výškou výčnělků K a vzdáleností mezi výčnělky L_1 a (c) hrubý povrch s výškou výčnělků K a vzdáleností mezi výčnělky $L_2 > L_1$

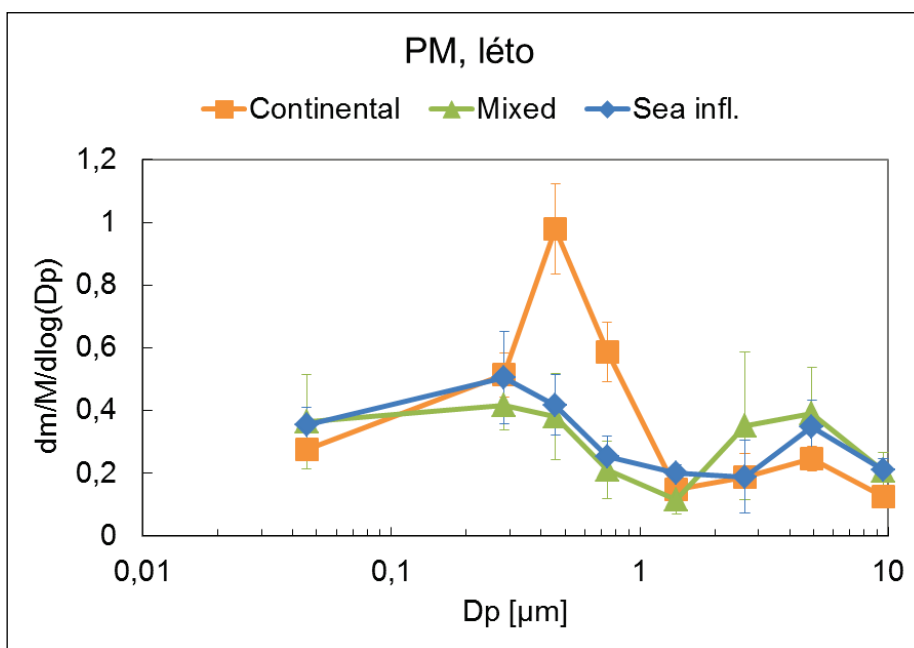
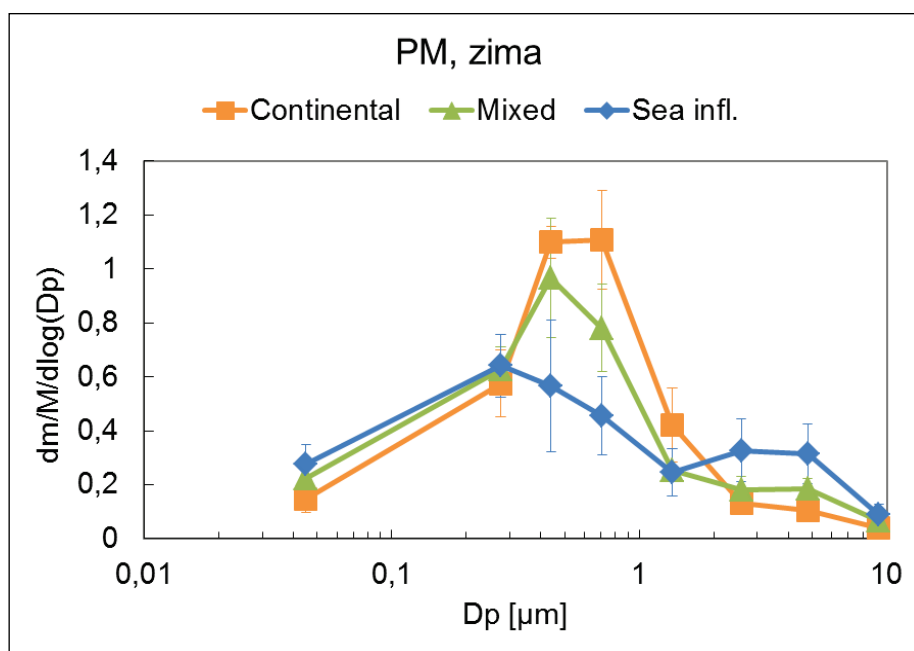
Hmotnostní velikostní distribuce aerosolu v Praze a jeho rozpustných složek ve vodě během topné a netopné sezóny za použití aerosolového sušiče – vliv původu vzduchových hmot

(Ing. Jaroslav Schwarz, CSc.; schwarz@icpf.cas.cz)

Schwarz J., Štefancová L., Maenhaut W., Smolík J., Ždímal V.: Mass and Speciated Size Distribution of Prague Aerosol during Heating and non-Heating Seasons Using Aerosol Dryer – the Influence of Air Mass Origin. *Sci. Total Environ.* 437, 348–362 (2012).

(spolupráce: Ghent University, Belgie)

Analýzou hmotnostních velikostních distribucí atmosférického aerosolu a v něm obsažených ve vodě rozpustných organických látek (WSOC) a anorganických iontů získaných pomocí modifikovaného Bernerova kaskádního impaktoru vybaveného sušením odebíraného aerosolu byly zjištěny výrazné rozdíly v jejich velikostních distribucích v závislosti na původu vzduchových hmot v době odběrů.



Normalizované hmotnostní velikostní distribuce aerosolů v zimě a v létě pro kontinentální, mořem ovlivněné a směsné vzduchové hmoty

Deposice amorfních vrstev montmorillonitu laserovou ablací

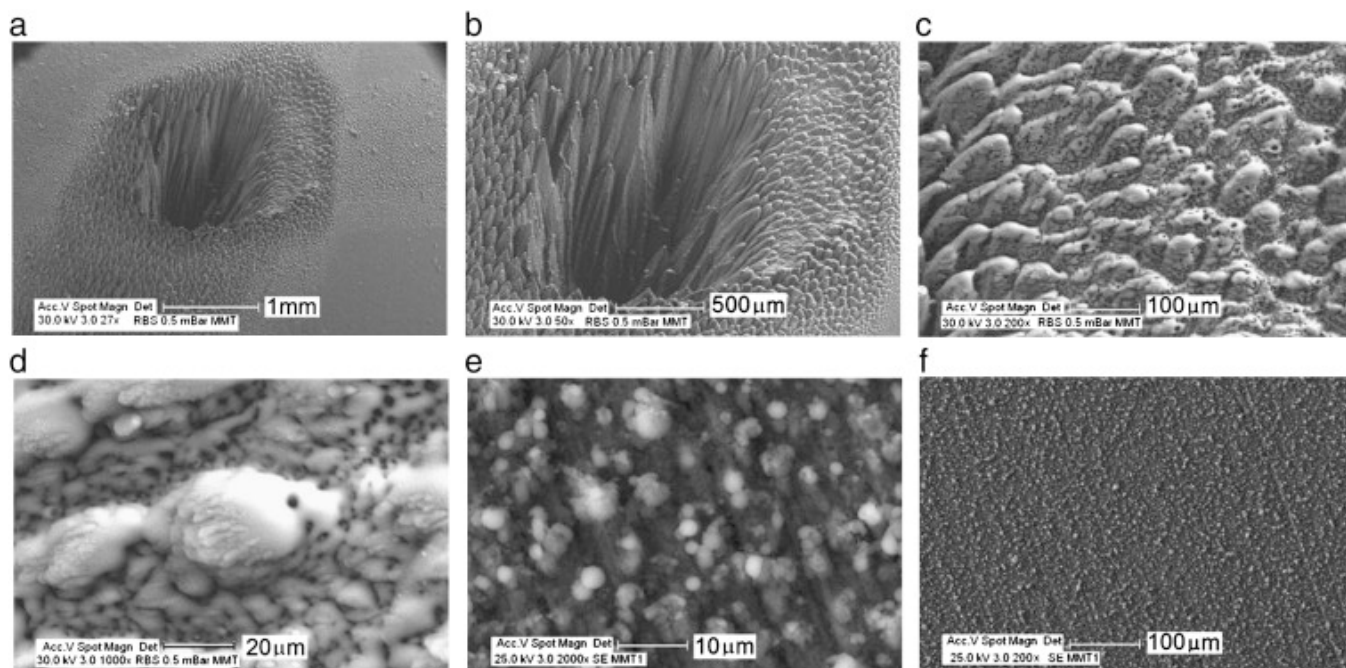
(RNDr. Josef Pola, DrSc.; pola@icpf.cas.cz)

Duchek P., Urbanová M., Pokorná D., Kupčík J., Šubrt J., Pola J.: Laser-Induced Ablative Amorphisation of Montmorillonite. *J. Non-Cryst. Solids* 358, 3382-3387 (2012).

(spolupráce: Západočeská univerzita, Plzeň; Ústav anorganické chemie AV ČR, Husinec-Řež)

Laserová ablace montmorillonitu, provedená TEA CO₂ laserem poskytla amorfní filmy s vynikající adhezí. Filmy nemají mezivrstevnou strukturu původního materiálu a skládají se

z aglomerátů dehydratovaných částic s nano- a mikrometrickou velikostí. Filmy byly charakterizovány elektronovou mikroskopií, rentgenovou difrakcí a infračervenou spektroskopií. Výsledky ukázaly, že laserový proces vede ke kompletní amorfizaci ablaovaných částic s rozdílnou morfologií ozařovaných míst a deponovaného filmu v závislosti na rozdílné energii laseru. Výsledky mohou být aplikovány pro přípravu nanokompozitů a nanostrukturovaných filmů založených na jílech.



Obrázky ze skenovacího elektronového mikroskopu: kráter po ablaci (a, b) a jeho okolí (c, d) společně s filmem deponovaným na Cu substrátu (e, f)

Příprava nanotrubic oxykarbidu křemíku s využitím Ge jako templátu

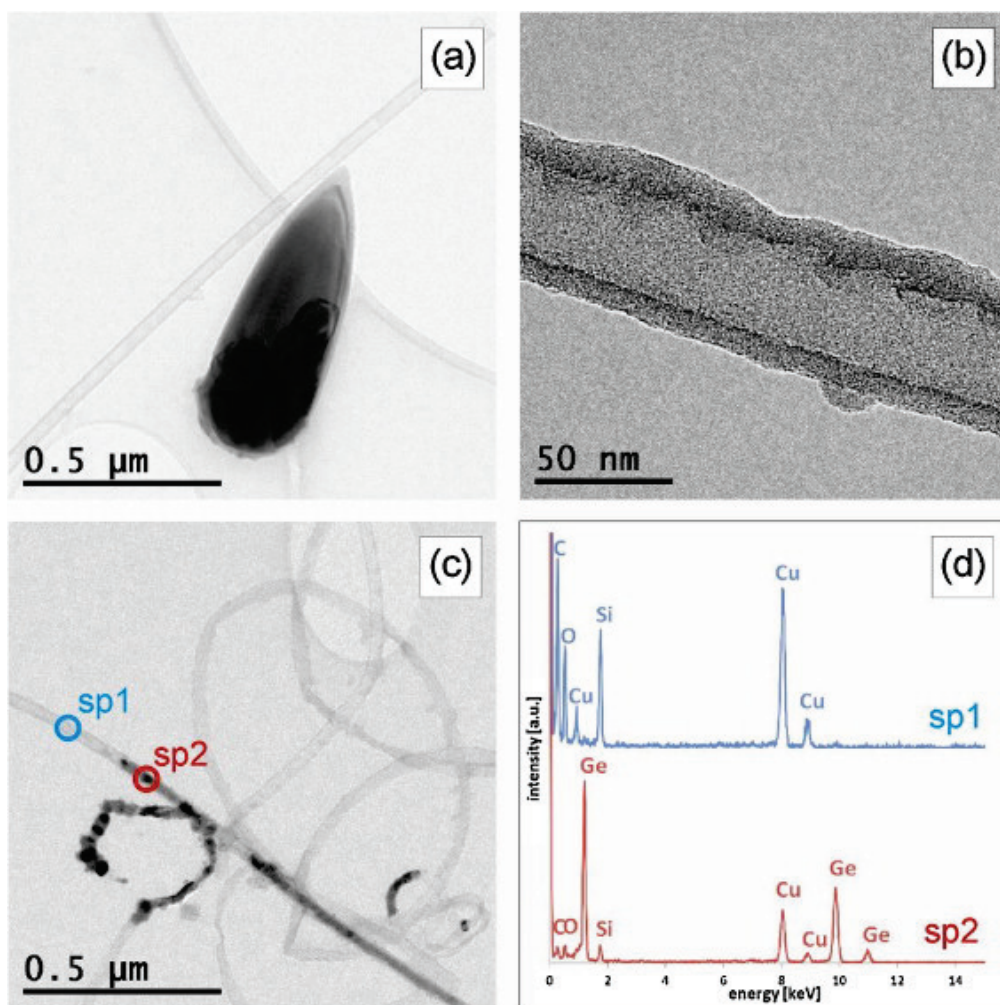
(RNDr. Radek Fajgar, CSc.; fajgar@icpf.cas.cz; RNDr. Vladislav Dřínek, CSc.; drinek@icpf.cas.cz)

Krabáč L., Klementová M., Šubrt J., Fajgar R., Kupčík J., Bastl Z., Stuchlíková The Ha, Dřínek V.: Preparation of Si/O/C Nanotubes Using Ge Nanowires as Template . *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 97, 94-98 (2012).

(spolupráce: Ústav anorganické chemie AV ČR, Husinec-Řež; Fyzikální ústav AV ČR, Praha; Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, Praha)

Nanotrubičky oxykarbidu křemíku Si/O/C byly připraveny dvoukrokovým postupem. V prvním kroku je vytvořen nanostrukturovaný drát metodou depozice z plynné fáze za nízkého tlaku (LPCVD) rozkladem hexamethyldigermanu Ge_2Me_6 a 1,1,3,3-tetramethyldisilazanu $(\text{Me}_2\text{SiH})_2\text{NH}$. Tyto těkavé prekurzory se po smíchání vedou do reaktoru, kde při teplotě 550 °C poskytnou nanodráty. V druhém kroku je z připraveného depozitu při 850 °C ve vakuu odpařeno těkavé germaniové jádro. Výsledkem jsou Si/O/C nanotrubičky. Depozit byl charakterizován Ramanovou spektroskopií, skenovací a vysokorozlišenou transmisní mikroskopií, EDX a fotoelektronovou spektroskopií.





Obrázky HRTEM (elektronová mikroskopie s vysokým rozlišením): (a) Si/C/O nanotrubička a Ge částice, (b) obrázek amorfni Si/C/O nanotrubičky, (c) dutá Si/C/O nanotrubička a germaniem vyplněná nanotrubička; červené a modré kruhy označují plochy odpovídající EDX analýze, (d) EDX analýza vyznačené plochy na duté Si/C/O nanotrubičce z obrázku (c) (sp¹) a vyplněné nanotrubičce (sp²). Cu signál pochází z měřicí podložky

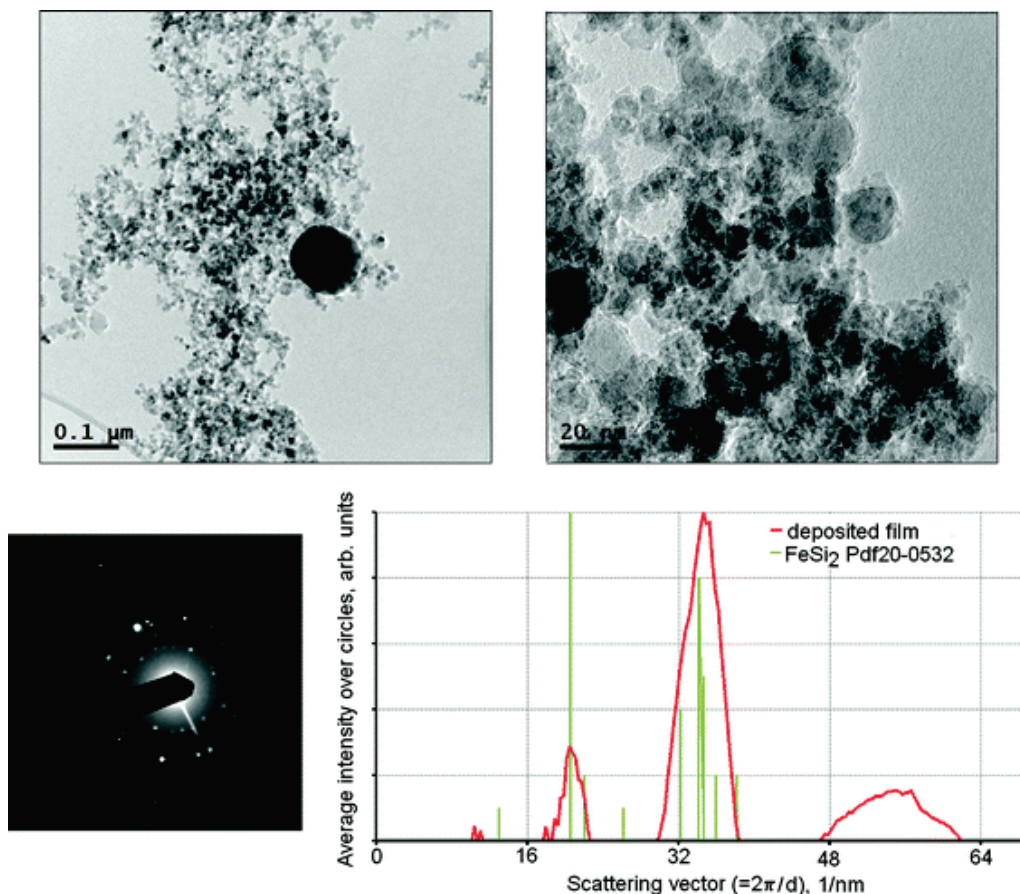
Příprava tenkých Mg₂Si filmů laserovou ablací

(RNDr. Josef Pola, DrSc.; pola@icpf.cas.cz)

Pola J., Urbanová M., Pokorná D., Bakardjieva S., Šubrt J., Bastl Z., Gondal M.A., Masoudi H.M.: IR Laser Photodeposition of α -Fe/Si Films Developing Nanograins of Ferrisilicate, Iron Disilicide and Rare Hexagonal Iron upon Annealing. *Dalton Trans.* 41, 1727-1733 (2012).

(spolupráce: Ústav anorganické chemie AV ČR, Husinec-Řež; Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, Praha; King Fahd University of Petroleum & Minerals, Dhahran, Saudská Arábie)

IČ laserově-indukovaná fotolýza směsi Fe(CO)₅-SiH₄ v plynné fázi probíhá jako SiH₄-fotosensibilovaný rozklad Fe(CO)₅, který je katalyzován produkty rozkladu. Výsledkem reakce je depozice amorfniho Si/Fe nanokompozitního filmu. Analýzy deponovaného a následně tepelně procesovaného filmu byly provedeny pomocí FTIR, Ramanovy a fotoelektronové spektroskopie, rentgenové difrakce a elektronové mikroskopie. Deponované filmy jsou amorfni s obsahem krystalických nanostruktur silicidu železa FeSi₂. Filmy podléhají oxidaci na vzduchu, při níž se povrchová vrstva oxiduje na oxidy železa a hydrogenovaný oxid křemičitý. Při tepelném procesování se pozoruje vývoj nanokrystalických struktur ferisilikátů Fe_{1.6}SiO₄, nanostrukturovaného FeSi₂ uzavřeného v uhlíkovém obalu a ojedinělé vysokotlaké krystalické formy hexagonálního železa, stabilního i při běžných podmínkách. Mechanismus tvorby těchto nanostruktur je diskutován jako reakce v plynné fázi a reakce v pevné fázi.



HRTEM obrázky a elektronová difrakce depozitu získaného ze směsi $\text{Fe}(\text{CO})_5$ (5 Torr) a SiH_4 (25 Torr)

Výčet nejdůležitějších patentů, přihlášek patentů a PUV za rok 2012

Způsob chemické depolymerace odpadního polyethyltereftalátu

(Ing. Milan Hájek, CSc.; hajek@icpf.cas.cz)

Hájek M., Sobek J., Brustman J., Veselý V., Drahoš J.: Pat. No. CN101688015, applied: 10.01.12, patented: 12.09.19.

Způsob chemické depolymerace odpadního polyethyltereftalátu účinkem mikrovlnného záření a s použitím solvolýzy za přítomnosti katalyzátoru, kde se odpadní polyethyltereftalát v prvním stupni smísí s aktivátorem silně absorbujícím mikrovlny a směs se vloží do mikrovlnného pole, působením mikrovlnného záření o frekvenci 915 až 2450 MHz a výkonu zářiče 0,1 až 0,5 kW/kg vsádky při teplotě 230 až 330 °C a za atmosférického tlaku se roztaví, a v druhém stupni se vystavena pokračujícímu mikrovlnnému záření podrobí solvolýze, tj. kyselé či alkalické hydrolýze, alkoholýze či glykolýze v přítomnosti katalyzátoru a při atmosférickém tlaku za vzniku kyseliny tereftalové, jejích solí či jejích esterů a ethylenglykolu.

Silně kyselý ionexový katalyzátor s afinitou k lipofilním reagentům a způsob jeho přípravy

(Ing. Karel Jeřábek, CSc., kjer@icpf.cas.cz)

Jeřábek K., Hanková L., Holub L., Corain B., Zecca M., Centomo P., Bonato I.: Pat. No. CZ303211, applied: 11.03.22, patented: 12.04.12.

Řešení se týká silně kyselého iontového katalyzátoru s afinitou k lipofilním reagentům se sulfonovanými aromatickými jádry polymerního skeletu, u kterého 20 až 70 % aromatických jader polymerního skeletu katalyzátoru obsahuje acylové skupiny s řetězcem 2 až 12 atomů

uhlíku. Při jeho přípravě se postupuje tak, že před zavedením silně kyselých skupin sulfonací se polymerní skelet vystaví účinkům acylačního činidla při teplotě od 50 °C až do teploty varu acylačního činidla a po dobu 1 až 4 h.

Způsob zplyňování upravené biomasy a zařízení k jeho provádění

(Doc. Ing. Karel Svoboda, CSc., svoboda@icpf.cas.cz)

Svoboda K., Smetana J., Štojdil J., Šulc J., Vacek J.: Pat. No. CZ303367, applied: 11.07.01, patented: 12.07.09.

Způsob zplyňování upravené biomasy ve vertikálním reaktoru sestávajícího ze dvou technologických částí podle kterého se v první části reaktoru biomasa zbaví vlhkosti na úroveň 2 až 3 hmotn. % a částečně se pyrolyzuje ohřevem na teplotu 130 až 350 °C a ve druhé části reaktoru se obsah ohřeje pomocí zplyňovacího média s obsahem kyslíku na teplotu nad 1000 °C za vzniku surového plynu, který se z horní sekce druhé části reaktoru odvádí k následnému vyčištění a odstranění pevných uhlíkatých částic a popele. Zařízení používá vertikální reaktor s dopravníkem a přívodem biomasy ve spodní části reaktoru a odvodem surového plynu v horní části reaktoru, přičemž reaktor obsahuje ve spodní části trubku s dopravníkem, která přechází do kónicky se rozšiřující horní části s přívodem zplyňovacího média.

Způsob přípravy oxidu titaničitého

(Ing. Olga Šolcová, DSc., solcova@icpf.cas.cz)

Šolcová O., Matějová L., Matěj Z.: Pat. No. CZ303438, applied: 08.05.27, patented: 12.08.02.

Způsob přípravy chemicky čistého krystalického oxidu titaničitého výhradně anatasové fáze spočívá v provedení hydrolyzy kapalných kovových alkoxidů v roztoku peroxidu vodíku za současného chlazení reakce při teplotě (od -2°C do +5°C) s následnou kontrolovanou kalcinací surového produktu v proudu vzduchu v rozmezí teplot 200-550°C. Příprava variabilní a předem zvolené velikosti krystalitů anatasu je založena na změně doby a/nebo teploty kalcinace.

Způsob přípravy krystalické formy oxidu titaničitého

(Ing. Olga Šolcová, DSc., solcova@icpf.cas.cz)

Šolcová O., Matějová L., Klusoň P., Cajthaml T.: Pat. No. CZ303439, applied: 08.06.25, patented: 12.08.02.

Při způsobu přípravy krystalické formy oxidu titaničitého ze surového gelového meziproductu se surový gelový meziproduct podrobí dvoustupňové kombinované extrakci podkritickou vodou a následně podkritickým nebo nadkritickým methanolem do stavu krystalizace, zformuje se mikro-mezoporézní struktura se specifickým povrchem nad 100 m²/g produktu a následně se redukuje obsah organických látek v produktu pod 0,2 % elementárního C. Požadované velikosti póru lze získat regulací teploty extrakce v rozmezí 100 až 250 °C za konstantních tlaků v intervalu 5 až 30 MPa ve druhém stupni extrakce.

Způsob stanovení celkového obsahu dehtu v plynu produkovaném zplyňováním paliva

(Ing. Miroslav Punčochář, DSc., puncochar@icpf.cas.cz)

Punčochář M., Skoblia S., Kameníková P.: Pat. No. CZ303491, applied: 08.12.08, patented: 12.09.10.

Způsob stanovení celkového obsahu dehtu v plynu produkovaném zplyňováním paliva, při kterém se z odebraného vzorku plynu na filtru za teploty 250 až 350 °C odstraní prachové částice a definované množství plynu se přivede pomocí nosného plynu na termostaticky řízenou chromatografickou kolonu s teplotou 30 až 100 °C napojenou na detektor a po detekci nižších uhlovodíků prošlých kolonou se průtok nosného plynu kolonou obrátí, kolona se ohřeje na teplotu 300 až 350 °C a desorbovaný dehet z kolony se přivede do detektoru ke stanovení celkového obsahu dehtu.

Způsob přípravy a regenerace pelet z křemičitanových a hlinitokřemičitanových mesoporézních molekulových sít a pelety připravené tímto způsobem

(Ing. Olga Šolcová, DSc., solcova@icpf.cas.cz)

Šolcová O., Topka P., Soukup K.: Pat. No. CZ303642, applied: 08.05.27, patented: 12.12.17.

Při způsobu přípravy pelet z křemičitanových a hlinitokřemičitanových mesoporézních molekulových sít lisováním bez použití aditiv se mesoporézní molekulové síto lisuje na pelety za použití lisovacích tlaků v rozmezí 0,7 MPa až 4,7 MPa. Při regeneraci pelet po katalytické reakci se pelety izolují a zahřívají na vzduchu při teplotě 500 °C.

Způsob výroby [6]helicenů fotocyklizací a zařízení k jeho provádění

(Ing. Jan Storch, Ph.D., storch@icpf.cas.cz)

Storch J., Círka V., Bernard M., Vokál J.: Pat. Appl. No. PV 2012 – 245, applied: 12.04.11.

Vynález se týká způsobu přípravy racemických substituovaných [6]helicenů i samotného [6]helicenu pomocí fotochemických reakcí ve vsádkovém či průtočném fotoreaktoru vybaveném zdrojem UV/Vis záření.

Způsob dekontaminace tuhých odpadů

(Ing. Milan Hájek, CSc., hajek@icpf.cas.cz)

Hájek M., Sobek J., Mašín P., Hendrych J., Kroužek J., Kubal M., Kukačka J.: Pat. Appl. No. PV 2012 – 269, applied: 12.04.19.

Vynález se týká způsobu dekontaminace tuhých materiálů termickou desorpcí s použitím mikrovlnného záření. Tuhé materiály mohou být kontaminovány zejména perzistentními chlorovanými organickými a ropnými látkami, které představují nežádoucí ekologickou zátěž.

Způsob separace plynu ze směsi plynů

(Ing. Petr Uchytíl, CSc., uchyt@icpf.cas.cz)

Petričkovič R., Uchytíl P., Řezníčková J., Setničková K., Storch J.: Pat. Appl. No. PV 2012 – 725, applied: 12.10.25.

Byl navržen nový postup dělení plyných směsí pomocí dynamických kapalných membrán. Byly provedeny úspěšné experimenty, které ukazují na možnost průmyslového využití tohoto procesu. Podařilo se efektivně rozdělit binární směs oxid uhličitý – metan.

Zařízení k ředění aerosolů

(Dr. Ing. Vladimír Ždímal, zdimal@icpf.cas.cz)

Ždímal V., Slezák J., Goliáš J., Pušman J.: PUV No. CZ24340, applied: 12.05.15, patented: 12.09.24.

Technické řešení se týká zařízení k ředění aerosolů pro vzorky aerosolových analyzátorů s uzavřeným systémem, se vstupem obsahujícím rozdělovač proudu odebíraného aerosolu na větev s vyměnitelnou kapilárou a na větev s filtrem, a s následným spojením obou větví na výstupu zařízení. Zařízení umožňuje snížení koncentrací aerosolů za účelem zajištění odběru reprezentativního vzorku, který splňuje operační limity běžných aerosolových analyzátorů.

Zařízení pro čištění odpadních vod obsahujících organické látky

(Ing. Pavel Krystyník, krystynik@icpf.cas.cz)

Wimmerová L., Žebrák R., Domín T., Klusoň P., Krystyník P.: PUV No. CZ24538, applied: 12.07.13, patented: 12.11.12.

Vynález se týká zařízení pro čištění odpadních vod obsahující organické látky s využitím zářivek s ultrafialovým zářením a peroxidem vodíku. Zařízení se skládá ze zásobní nádrže kontaminované vody propojené s dávkovačem peroxidu vodíku a fotoreaktorem, ve kterém dochází k ozáření kontaminované vody a peroxidu vodíku. Tím dojde k vzniku vysoce reaktivních hydroxylových radikálů, které napadají organické látky a způsobují jejich postupnou mineralizaci na anorganické produkty.

Zařízení pro fluidní zplyňování tuhých paliv

(Ing. Michael Pohořelý, Ph.D., pohorely@icpf.cas.cz)

Pohořelý M., Kameníková P., Svoboda K., Skoblia S., Jeremiáš M., Šyc M., Punčochář M., Hartman M.: PUV No. CZ24582, applied: 12.07.27, patented: 12.11.19.

Technické řešení se týká zařízení pro fluidní zplyňování různých tuhých paliv, které umožňuje sledování vlivu typu paliva a operačních podmínek na stabilitu procesu zplyňování a kvalitu produkovaného plynu.

Podrobnější informace o výsledcích a činnosti ÚČHP lze nalézt na webové stránce ústavu (<http://www.icpf.cas.cz/>).



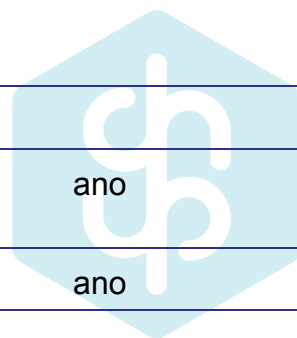
Spolupráce s vysokými školami na uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů a vzdělávání středoškoláků

Číslo	Bakalářský program	Název VŠ	Přednášky	Cvičení	Vedení prací	Učební texty
1	Farmaceutické inženýrství	VŠCHT Praha	ano	ano		
2	Chemie a chemické technologie	VŠCHT Praha		ano		
3	Chemické výpočty	VŠCHT Praha		ano		
4	Syntéza a výroba léčiv	VŠCHT Praha			ano	
5	Alternativní zdroje energie	VŠCHT Praha	ano	ano	ano	
6	Laboratoře analýzy paliv	VŠCHT Praha		ano		ano
7	Numerická matematika I	UJEP Ústí n. L.	ano	ano		
8	Počítačové modelování ve vědě a technice	UJEP Ústí n. L.	ano	ano		
9	Simulace transportních jevů I	UJEP Ústí n. L.	ano		ano	ano
10	Zpracování ropy a petrochemie	UJEP Ústí n. L.	ano		ano	ano
11	Zásady odborné komunikace	UJEP Ústí n. L.	ano			
12	Odpadové hospodářství	UJEP Ústí n. L.	ano		ano	ano
13	Úvod do matematiky II	UJEP Ústí n. L.		ano	ano	
14	Toxikologie a chemie	UJEP Ústí n. L.	ano		ano	ano
15	Energetika a životní prostředí	UJEP Ústí n. L.	ano	ano		
16	Programování v chemii	UJEP Ústí n. L.		ano	ano	
17	Úvod do molekulárních simulací	UJEP Ústí n. L.	ano	ano		
18	Statistická fyzika	UJEP Ústí n. L.	ano			

Číslo	Magisterský program	Název VŠ	Přednášky	Cvičení	Vedení prací	Učební texty
1	Vícefázové reaktory	VŠCHT Praha	ano			
2	Bioinženýrství	VŠCHT Praha	ano	ano		ano
3	Syntéza a výroba léčiv	VŠCHT Praha			ano	

Číslo	Magisterský program	Název VŠ	Přednášky	Cvičení	Vedení prací	Učební texty
4	Laboratoře analýzy paliv	VŠCHT Praha		ano		ano
5	Fyzikální organická chemie	PřF UK Praha	ano		ano	ano
6	Struktura a reaktivita	PřF UK Praha	ano			ano
7	Meteorologie a klimatologie	MFF UK Praha	ano			ano
8	Obnovitelné zdroje energie	ČZU Praha	ano	ano	ano	
9	Numerická matematika II	UJEP Ústí n. L.	ano	ano		
10	Počítačové modelování ve vědě a technice	UJEP Ústí n. L.	ano	ano		
11	Zásady odborné komunikace	UJEP Ústí n. L.	ano			
12	Úvod do mezoskopických simulací	UJEP Ústí n. L.	ano	ano		
13	Dekontaminační a bioremediační technologie	UJEP Ústí n. L.	ano	ano		

Číslo	Doktorský program	Název VŠ	Přednášky	Cvičení	Vedení prací	Učební texty
1	Organická technologie	VŠCHT Praha	ano		ano	ano
2	Fyzikální chemie pro technologickou praxi	VŠCHT Praha	ano		ano	
3	Fotochemie	VŠCHT Praha	ano			ano
4	Mikrovláknová chemie	VŠCHT Praha	ano			ano
5	Aerosolové inženýrství	VŠCHT Praha	ano			ano
6	Bubliny, kapky, částice	VŠCHT Praha	ano			
7	Superkritická rozpouštědla	VŠCHT Praha	ano			
8	Aplikovaná termodynamika	VŠCHT Praha	ano			
9	Molekulární dynamika	UJEP Ústí n. L.	ano	ano		
10	Počítačové modelování ve vědě a technice	UJEP Ústí n. L.	ano		ano	
11	Numerická matematika	UJEP Ústí n. L.	ano		ano	



Číslo	Doktorský program	Název VŠ	Přednášky	Cvičení	Vedení prací	Učební texty
12	Analytická chemie životního prostředí	UJEP Ústí n. L.			ano	
13	Energetické využití biomasy	ČZU Praha	ano		ano	

Účast pracoviště na sekundárním vzdělávání (středoškolská výuka)

Číslo	Akce	Pořadatel/škola	Činnost
1	Otevřená věda 3	SSČ AV ČR, Praha	Stáže mimopražských středoškolských studentů v laboratořích ústavu

Vzdělávání veřejnosti

Číslo	Akce	Pořadatel	Činnost
1	Seminář separace plynů a par membránovými separačními procesy	Česká membránová platforma o. s./ ÚCHP AV ČR	vzdělávací činnost na seznámení široké veřejnosti s nejnovějšími trendy v oboru separace plynů a par membránovými separačními procesy
2	Týden vědy a techniky	AV ČR, Národní, Praha	přednášková činnost
3	Kick-off meeting projektu UFIREG	ČHMÚ, 26.1.2012	pozvaná přednáška - Aktivity aerosolové laboratoře v oblasti atmosférických aerosolů a aerosolových technologií
4	Seminář ÚFCH VŠCHT	Ústav fyzikální chemie VŠCHT, 30.11.2012	Pozvaná přednáška - Měření kinetiky homogenní nukleace
5	Přednáška pro management firmy Precheza	Precheza, a.s., 23.11.2012	Pozvaná přednáška – Metody měření aerosolových nanočástic



Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou

ÚCHP spolupracoval v roce 2012 se Svazem chemického průmyslu ČR jako jeho řádný člen. Aktivity byly soustředěny především do činnosti těchto technologických platform:

- 1) Česká technologická platforma pro udržitelnou chemii (SusChem ČR) - podíl na formulaci strategické výzkumné agendy a implementačního akčního plánu (<http://www.suschem.cz/>),
- 2) Česká technologická platforma pro užití biosložek v dopravě a chemickém průmyslu (ČTPB) (<http://www.biopaliva-ctpb.cz/index.php>),
- 3) Česká membránové platforma (CZEMP) – podíl na sestavování Anglicko-českého a česko-anglického výkladového membranologického slovníku (<http://www.czemp.cz/>).

Společné projekty výzkumu a vývoje podpořené z veřejných prostředků

Zplyňování dřevěných peletek a štěpků inovačním způsobem v bezroštovém zařízení s pomalu se sunoucí vrstvou směrem nahoru

Název projektu: Nové postupy a procesy zplyňování biomasy

Byla vyvinuta inovační zplyňovací technologická metoda pro zplyňování dřevěných pelet, směsných pelet a upravené dřevěné štěpky. Nová patentovaná metoda je založena na pomalém vzestupném pohybu pelet/štěpky prostřednictvím vertikálního šnekového dopravníku, využití odpadního tepla, na rozšířené sekci v horní části válcovitého reaktoru a stupňovitým přívodem vzduchu pro dosažení delších časů prodloužení plynu a uhlíkatého zbytku v reaktoru a pro dosažení teplot nad 1000 °C, potřebných pro dosažení vyššího stupně zplynění uhlíkatého zbytku a pro termickou destrukci dehtových sloučenin v produkovaném plynu. Výsledný vyrobený plyn má nízkou koncentraci dehtu a po odstranění prachu a přebytečné vlhkosti (případně též amoniaku) může být využit k pohonu plynového spalovacího motoru. Separované částice nezreagovaného uhlíkatého koksíku mohou sloužit buď k výrobě směsných peletek (dřevo-uhlík) nebo k přímému využití jako tzv. biochar v zemědělství při zúrodňování půd.

Poskytovatel: MPO (FR-TI1/600)

Partnerské organizace: VŠCHT Praha, UJEP Ústí n. Labem; D.S.K. Ltd., Teplice

Citace: Svoboda K., Smetana J., Štojd J., Šulc J., Vacek J.: Pat. No. CZ303367, applied:

11.07.01, patented: 12.07.09. Šulc J., Štojd J., Richter M., Popelka J., Svoboda K., Smetana J., Vacek J., Skoblia S., Buryan P.: Biomass Waste Gasification - Can Be the Two Stage Process Suitable for Tar Reduction and Power Generation?. *Waste Management* 32, 692-700 (2012).

Svoboda K., Pohořelý M., Jeremiáš M., Kameníková P., Hartman M., Skoblia S., Šyc M.:

Fluidized bed gasification of coal-oil and coal-water-oil slurries by oxygen-steam and oxygen-CO₂ mixtures. *Fuel Process. Technol.*, 95, 16-26 (2012).

Návrh chemických bariér pro dekontaminaci silně znečištěných podpovrchových vod

Název projektu: Reaktivní chemické bariéry pro dekontaminaci silně znečištěných podzemních vod

Projekt je zaměřen na výzkum a vývoj podmínek pro zavedení chemického reaktivního členu (CRC) do sanační technologie permeabilních reaktivních bariér (PRB) za účelem dekontaminace podzemních vod silně znečištěných průmyslovou činností. Byly zkoumány možnosti využití čtyř typů fotochemických a chemicko-katalytických procesů pro sanaci modelových i reálných podzemních vod z vytipované průmyslové lokality. Poloprovozní zkouškou byly verifikovány podmínky a technické postupy pro úspěšnou aplikaci této progresivní technologie. Dále byl zpracován metodický postup pro aplikaci CRC/PRB technologie. Součástí řešení bylo také

ověření možnosti kombinace CRC s jinými sanačními postupy aplikovanými v PRB (především adsorpce a biofiltrace). V souladu se současnými světovými trendy bude verifikovaná technologie nabízet finančně schůdné a pro životní prostředí efektivní řešení dekontaminace komplexního znečištění podzemních vod.

Poskytovatel: MPO (FR-TI1/065)

Partnerská organizace: Dekonta, a.s., Dřetovice, ČR

Citace: Wimmerová L., Žebrák R., Domín T., Klusoň P., Krystyník P.: PUV No. CZ24538, applied: 12.07.13, patented: 12.11.12.

Vývoj metodiky pro dekontaminaci odpadů

Název projektu: Dekontaminace odpadů kombinací termické desorpce a katalytického spalování

Předmětem projektu byl vývoj a provozní ověření unikátní technologie dekontaminace nebezpečných odpadů (např. zemin kontaminovaných organickými látkami, odpadů z farmaceutických výroby apod.), která je založena na termické desorpci organických látek obsažených v odpadech a následné destrukci desorbovaných podílů metodou katalytického spalování. Nejdříve byly realizovány výzkumné aktivity zaměřené na vyřešení některých technických problémů souvisejících s provozní aplikací nové technologie (např. efektivní odstranění prachových podílů z proudu vzdušiny vstupujícího do katalytické spalovny, ověření vhodnosti různých komerčně dostupných katalyzátorů pro spalování široké škály desorbovaných organických látek). Ve druhé fázi bylo přistoupeno k ověření účinnosti navržené technologie v reálných podmínkách.

Poskytovatel: MPO (FR-TI1/059)

Partnerská organizace: Dekonta, a.s., Dřetovice

Citace: Matějová L., Topka P., Jirátová K., Šolcová O.: *App. Catal. A* 443-444, 40-49 (2012).

Ioncolor – aditiva na bázi iontových kapalin

Název projektu: Výzkum a vývoj nátěrových hmot s využitím iontových kapalin

Výsledkem výzkumného projektu budou zcela nové progresivní nátěrové hmoty s novými užitečnými vlastnostmi a technologie jejich výroby.

Poskytovatel: MPO (FR-TI3/057)

Partnerské organizace: Barvy a Laky TELURIA, s.r.o., Skrchov, TECHEM CZ, s.r.o., Praha

Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané na základě hospodářských smluv

Číslo	Zadavatel	Výsledek (anotace)	Uplatnění
1	Procter & Gamble Company, Brusel	Výzkum a vývoj poloprovozních mikroreaktorů	Přestup tepla v mikromísících a detailní plán experimentální charakterizace microSAR mixérů
2	Favea Europe, s.r.o.	Návrh provozní kolony s požadovanou kapacitou zadavatele pro rafinaci rostlinných kapalných výluhů	Využití provozní kolony VPE 25 s vibrujícími patry pro rafinaci kapalných výluhů ze dřeva jehličnatých stromů od terpenických látek
3	LASAK, s.r.o.	Optimalizace textury zubních náhrad	Aplikace ve výrobě
4	SPUR, a.s.	Vývoj metodiky měření účinnosti nových typů nanofiltrů vůči nanočásticím	Komerční zakázka, podaný projekt
5	ČHMÚ	Měření účinnosti filtrů vůči nanočásticím	Komerční zakázka

Číslo	Zadavatel	Výsledek (anotace)	Uplatnění
6	Norwegian University of Science and Technology, NTNU	Experimentální měření rozpadu bublin v definovaném turbulentním poli spojené s detailní charakteristikou turbulentního pole v experimentální cele s koaxiálními tryskami	Datová báze pro pravidla rozpadu bublin v turbulentním poli kapaliny sloužící jako uzávěrové rovnice při modelování plyno-kapalinových zařízení pomocí metod založených na populačních bilancích
7	VÚBP, v. v. i.	Stanovení penetrace nanočástic osobními ochrannými prostředky	Závěrečná zpráva (subdodávka projektu MPSV)
8	SÚJCHBO, v. v. i.	Studium interakce aerosolu s radioaktivním zářením	Závěrečná zpráva (subdodávka projektu MV)

Odborné expertizy zpracované v písemné formě pro státní orgány, instituce a podnikatelské subjekty

Číslo	Název	Příjemce/Zadavatel	Popis výsledku
1	Zpravodajské posudky pro program ALFA TAČR	TAČR	Posouzení kvality projektů
2	Elektrochemická příprava TBBS	VUCHZ a.s., Bratislava	Odborný posudek na výzk. zprávu
3	Charakterizace morfologie iontoměničových katalyzátorů ve zbobtnalém stavu	DOW Chemicals, USA	Příprava a charakterizace vzorku nového katalyzátoru
4	Oponentský posudek závěrečné zprávy projektů	MŽP, MŠMT (AMVIS)	Posudek zprávy

Zapojení do monitorovacích sítí

Objekt sledování: Početní velikostní distribuce aerosolů na pozadřové stanici ČHMÚ Košetice
 Název sítě: Evropské stanice pro pokročilý výzkum atmosférických aerosolů (European Supersites for Atmospheric Aerosol Research)

Program: EMEP/EUSAAR/ACTRIS/GAW

Provozovatel: Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i. ve spolupráci s ČHMÚ

Důvody zapojení do monitoringu: V rámci projektu EUSAAR dochází k standardizaci měření atmosférických aerosolů na kvalitativně nové úrovni. Získávaná data umožňují zahrnutí vlivu aerosolů do předpovědních meteorologických modelů pro zpřesnění jejich předpovědí a zároveň jako základna pro modelování vlivu aerosolů na klima. Po ukončení projektu EUSAAR v dubnu roku 2011 přešla tato agenda do evropského projektu ACTRIS.

Objekt sledování: Početní velikostní distribuce aerosolů na městské pozadřové stanici Praha-Suchdol

Název sítě: UFIREG/ACTRIS

Program: UFIREG/ACTRIS

Provozovatel: Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i. ve spolupráci s ČHMÚ

Důvody zapojení do monitoringu: V rámci projektů ACTRIS/UFIREG dochází k standardizaci měření atmosférických aerosolů na kvalitativně nové úrovni. Získaná data umožňují zahrnutí vlivu aerosolů do předpovědních meteorologických modelů pro zpřesnění jejich předpovědí a zároveň jako základna pro modelování vlivu aerosolů na klima.



Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště

Projekty programů EU řešené na pracovišti v roce 2012

Název projektu	Akronym	Číslo projektu a identifikační kód	Typ	Koordinátor	Řešitel
Fast, Flexible, Future Production Processes	F ³ Factory	FP7-NMP-2008-2-228867	IP	Bayer Technology Services GmbH, Leverkusen, Německo	V. Jiříčný
Hydrogen Oriented Underground Coal Gasification for Europe – Environmental and Safety Aspects	HUGE2	RFCR-CT-2011-00002	RFCS	Central Mining Institute (GIG), Katowice, Polsko	O. Šolcová
Advanced concepts and process schemes for CO ₂ free fluidized and entrained bed co-gasification of coals	FECUNDUS	RFCR-CT-2010-00009	RFCS	IRC-CNR, Neapol, Itálie	K. Svoboda
Aerosols, Clouds, and Trace gases Research InfraStructure Network Atmospheric Aerosol Research	ACTRIS	INFRA-2010-1.1.16-262254	IP	Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto di Metodologie per l'Analisi Ambientale (CNR-IMAA), Potenza, Itálie	V. Ždímal

Mezinárodní projekty, které pracoviště řeší v rámci mezinárodních vědeckých programů

Číslo	Název zastřešující organizace	Název programu	Název projektu česky / anglicky (číslo projektu)	Koordinátor (řešitel)	Spoluřešitel (instituce) / (počet spoluřešitelů)	Stát(y)
1	MŠMT	KONTAKT II - AMVIS	Mesoskopické modelování interakce proteinů s povrchy / Mesoscopic modeling of protein - surface interactions	ÚČHP (M. Lísal)	C. Colina (The Pennsylvania State University) / (1)	ČR, USA
2	MŠMT	KONTAKT II	Morfologie a aplikační vlastnosti mesoporézních poly(divinylbenzenů) / Morphology and application properties of mesoporous poly(divinylbenzenes)	ÚČHP (K. Jeřábek)	Feng-Shou Xiao (Zhejiang University) / (1)	ČR, Čína
3	MŠMT	GESHER/MOST	Separace oleje z mokré řasové biomasy pro výrobu biopaliv 3-tí generace enzymaticky katalyzovanou transesterifikací / Separation of fatty acids and lipids from wet algal biomass for the production of 3rd-generation biofuels by enzymatically catalyzed transesterification	ÚČHP (O. Šolcová), EcoFuel Laboratories (P. Kašánek)	/ (1)	ČR, Izrael



Číslo	Název zastřešující organizace	Název programu	Název projektu česky / anglicky (číslo projektu)	Koordinátor (řešitel)	Spoluřešitel (instituce) / (počet spoluřešitelů)	Stát(y)
4	AV ČR	Program interní podpory projektů mezinár. spolupráce AV ČR	Nové katalyzátory pro oxidaci VOC / New catalysts for VOC oxidation (M200720901)	ÚCHP (P. Topka)	S.A. Ojala (University of Oulu) / (1)	ČR, Finsko, Francie
5	AV ČR	Program interní podpory projektů mezinár. spolupráce AV ČR	Nové heterogenní katalyzátory pro ochranu životního prostředí / New heterogeneous catalysts for environmental protection	ÚCHP (L. Kaluža)	G. Tyuliev (Institute of Catalysis, Sofia) / (1)	ČR, Bulharsko
6	AV ČR	Program interní podpory projektů mezinár. spolupráce AV ČR	Složené molekulární vzory pro přípravu uspořádaných funkčních nanočástic / Combined Molecular Templates for Preparation of Organised Functional Nanostructures (M200720904)	ÚCHP (P. Klusoň)	C. Gwenin, F. Bresme, M.J. Maldoon (Bangor University of Wales; Imperial College of Science, London, Queen's University of Belfast) / (3)	ČR, Wales, Anglie, Severní Irsko
7	AV ČR	Program interní podpory projektů mezinár. spolupráce AV ČR	Sol-Gel Materials for Pollution Control, Water Purification and Bioencapsulation	ÚCHP (O. Šolcová)	/ (1)	ČR, Ukrajina
8	AV ČR	Program interní podpory projektů mezinár. spolupráce AV ČR	Synthesis and Thorough Characterization of Composite Functionalized Polymeric Nano-Structures REJECTED Materials	ÚCHP (O. Šolcová)	/ (1)	ČR, Turecko
9	AV ČR, National Science Council of Taiwan	PPP	Pokročilé procesy pro zplyňování, čištění plynu a produkci vodíku / Advanced processes for gasification, gas cleaning and hydrogen production	ÚCHP (K. Svoboda)	(National Central University Chung-Li) / (1)	ČR, Tchajwan
10	AV ČR, CSIR		Plasmová pyrolýza odpadních pneumatik / Plasma pyrolysis of scrap tyres for generation of syngas	ÚCHP (M. Punčochář)	/ (1)	ČR, Indie
11	NATO	Věda pro mír a ochranu	Removal of Heavy Metals and Radionuclides from Water	ÚCHP (O. Šolcová)	(CSTUM) / (2)	ČR, Slovinsko, Ukrajina

Číslo	Název zastřešující organizace	Název programu	Název projektu česky / anglicky (číslo projektu)	Koordinátor (řešitel)	Spolupřítel (instituce) / (počet spolupřítelů)	Stát(y)
12	NATO	SFP	Nové senzory založené na laserové ablaci grafenů / Novel sensors based on laser-ablated graphene	ÚCHP (R. Fajgar)	J. Blazevska-Gilev (University St Cyril and Methodius, Skopje) R. Tomovska (University of the Basque Country, San Sebastian) / (2)	ČR, Španělsko, Makedonie
13	US ARL	Cooperative agreement	Vývoj nástrojů mezoškálového modelování pro studium dynamické odezvy energetických materiálů / Development of Mesoscale Modeling Capability to Study the Dynamic Response of Reactive Materials (W911NF-10-2-0039)	ÚCHP (M. Lísal)	B.M. Rice, J.K. Brennan (US Army Research Laboratory, Adelphi, MD) / (1)	ČR, USA
14	MHTPL, University of Oulu	TEKES	Hybridní membránový proces pro zpracování vod / Hybrid Membrane Process for Water Treatment (HYMEPRO)	ÚCHP (O. Šolcová)	M. Pirlä, R. Keiski (University of Oulu, Corvinus University of Budapest, Lima National University of Engineering) / (18)	ČR, Finsko, Peru, Maďarsko
15	IUPAC	Aktivity Divize fyzikální a biofyzikální chemie IUPAC	Databáze rovnováhy kapalina-pára binárních směsí iontových kapalin a molekulárních sloučenin / Database on liquid-liquid equilibria of binary mixtures of ionic liquids and molecular compounds	ÚCHP (M. Bendová)	J. Jaquemin (Laboratoire PCMB, Tours) / (1)	ČR, Francie

Aktuální meziústavní dvoustranné (bilaterální) dohody

Spolupracující instituce	Stát	Název projektu
Technische Universität Wien	Rakousko	Flow of saturated vapors through porous membranes
Universität Wien	Rakousko	Black and Elemental Carbon at two European urban sites – site specific similarities and differences in method intercomparability
AC2T, Wiener Neustadt	Rakousko	Příprava nanostrukturovaných materiálů a studium mechanismů reakcí
University of Strasbourg	Francie	Novel Catalysts with Hierarchical Pore Structure: Preparation and Evaluation of the Transport Characteristics
LGC CNRS Toulouse	Francie	Vliv hydrodynamiky proudění kapalina-plyn na chování elektrochemického mikroreaktoru

Spolupracující instituce	Stát	Název projektu
US Army Research Laboratory, Adelphi, MD	USA	Development of Mesoscale Modeling Capability to Study Dynamic Response of Reactive Materials
CNR Rende	Itálie	Nové kompozitní membrány obsahující iontovou kapalinu a vybrané polymery pro specifické separace v systémech plyn/plyn, plyn/pára a pára/pára
Institute for Condensed Matter Physics, UAS, Lvov	Ukrajina	Modeling of Molecular Fluids at Extreme Conditions: Theory and Applications
Queen's University, Belfast	Severní Irsko	Mutual Solubility in Ionic Liquid + Organic Compound Systems
„Ilie Murgulescu” Institute of Physical Chemistry, RAS, Bukurešť	Rumunsko	Phase Equilibria in Molecular and Ionic Liquids Systems
Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry, RAS	Rusko	The intensification of waste water treatment
University of Kwazulu-Natal, Durban	Jihoafrická republika	Fluorinated Hydrocarbons as Potential Solvents in Liquid Extraction Processes

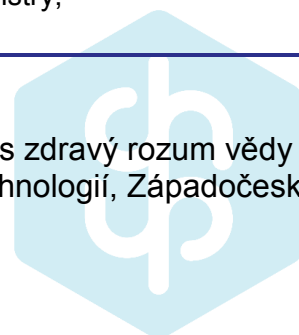
Akce s mezinárodní účastí, které ÚCHP v r. 2012 organizoval nebo v nich vystupoval jako spolupřadatel

Číslo	Název akce v češtině	Název akce v angličtině	Hlavní pořadatel akce	Počet účastníků celkem / z toho z ciziny	Výstup
1	Mezinárodní kongres CHISA	CHISA Congress	Orgit, s.r.o., ÚCHP	1200/800	přednášky, postery
2	Specializované sympozium evropských FP7 projektů F ³ Factory, COPIRIDE, POLYCAT, SYNFLOW a PILLS	Specialized Symposium : EU FP7 Projects: F ³ Factory, COPIRIDE, POLYCAT, SYNFLOW and PILLS	ÚCHP	145/100	přednášky, postery
3	Valné shromáždění účastníků evropského projektu F ³ Factory	General Assembly meeting of F ³ Factory project	ÚCHP	45/30	přednášky, hodnocení projektu
4	Česko-rakouské sympozium	The CZ – Austrian symposium on photochemistry	VŠCHT, ÚCHP	60/25	přednáška
5	Výroční konference České aerosolové společnosti	Annual conference of Czech Aerosol Society	Česká aerosolová společnost	36/4	přednášky, postery

Nejvýznamnější zahraniční vědci, kteří v r. 2012 navštívili ÚCHP

Číslo	Jméno vědce	Význačnost vědce a jeho obor	Mateřská instituce	Stát
1	Dr. Joëlle Aubin	vícefázové procesy v mikroaparátch	CNRS Toulouse	Francie
2	Dr. A.A. Chialvo	statistická termodynamika	ORL, Oak Ridge, TN	USA
3	Dr. David L. Cooper	teoretická a počítačová chemie	University of Liverpool, Chemistry Dept.	UK
4	Prof. Milan Čárský	vedoucí fakulty chemického inženýrství	University of Kwazulu-Natal, Durban	Jihoafrická republika
5	Dr. Yasuki Kansha	energetika	University of Tokyo	Japonsko
6	Prof. N.N. Kulov	chemické inženýrství	Ústav obecné a anorganické chemie, RAV, Moskva	Rusko
7	Prof. Aleksandra Lobnik	technologie sensorů	University of Maribor	Slovinsko
8	Prof. Benoit Louis	příprava kompoz. katalyzátorů s hierarchiz. mikrostrukturou	University of Strasbourg	Francie
9	Prof. Eric Marceau	heterogenní katalýza	Université Pierre et Marie Curie Paris VI	Francie
10	Assoc. Prof. Toshiyuki Sanada	numerická a experimentální vícefázová mechanika tekutin	Shizuoka University	Japonsko
11	Prof. Sezai Sarac	polymerní technologie, nano-inženýrství	Istanbul Technical University	Turecko
12	Prof. W.R. Smith	statistická termodynamika	University of Ontario, Institute of Technology	Kanada
13	Prof. Alla Spojakina	heterogenní katalýza	Institute of Catalysis, BAS, Sofie	Bulharsko
14	Prof. Roumiana P. Stateva	matematické modelování vysokotlakých rovnováh	Institute of Chemical Engineering, BAS, Sofie	Bulharsko
15	Prof. Alfred Wiedensohler	ředitel světové kalibrační laboratoře pro měření aerosolů	Leibniz Institute for Tropospheric Research, Leipzig	Německo
16	Prof. Yuriy Zub	příprava a aplikace sol-gel	O.O. Chuiko Institute of Surface Chemistry, Kijev	Ukrajina

14. Hálovu přednášku nazvanou " Energetika dnes a zítra: politika versus zdravý rozum vědy a techniky“ přednesl 3.10. 2012 Prof. Jaroslav Šesták, Centrum nových technologií, Západočeská univerzita v Plzni.



Nejvýznamnější popularizační aktivity ÚCHP v roce 2012

Číslo	Název akce	Popis aktivity	Spolupořadatel	Datum a místo konání
1	Dny otevřených dveří 2012	exkurze pro veřejnost do laboratoří ústavu	SSČ AV ČR	8.-9.11.2012, ÚCHP
2	Chemický jarmark VŠCHT Praha	stánek ÚCHP	VŠCHT Praha	13.9.2012, VŠCHT Praha
3	Noc v knihovně v rámci Pražské muzejní noci	prezentace ústavu	NTK Praha	9.6.2012, NTK, Praha
4	Kontakt dvojky, hodinový pořad o chemii toxických látek na ČRo 2	rozhlasové vysílání	ČRo 2	říjen 2012
5	řada rozhlas. natáčení pro magazín Natura připravovaný ČRo Leonardo	rozhlasové vysílání	ČRo Leonardo	červen až prosinec 2012
6	Dny pracovního lékařství	pozvaná přednáška „Případová studie – provozní měření aerosolových nanočástic“	SZÚ Praha	20.9.2012, SZÚ Praha
7	Týden vědy a techniky 2012	přednášky pro středoškoláky „Letem světem aerosolů“ (V. Ždímal), „Příběh černého zrna – dlouhá cesta k lékařskému využití námelových alkaloidů“ (P. Klusoň) a „Energie, entropie a několik vět, které nelze zakázat“ (M. Bendová)	SSČ AV ČR	5.11.2012, KAV ČR, Praha
8	Otevřená věda pro pedagogy	Pozvaná přednáška pro učitele chemie „Letem světem aerosolů“	AV ČR	15.11.2012, zámek Třešť

Domácí a zahraniční ocenění zaměstnanců ÚCHP v roce 2012

Číslo	Jméno oceněného	Druh a název ocenění	Oceněná činnost	Ocenění udělil
1	Jan Schraml	Hlávková medaile	nestor oboru	Nadace Nadání Josefa, Marie a Zdeňky Hlávkových
2	Karel Svoboda	Cena rektora za aplikovaný výzkum 2012	aplikovaný výzkum a patent ve zplyňování biomasy	rektor UJEP Ústí nad Labem
3	Jiří Hanika	Pamětný list ke 40. výročí SSCHI	spolupráce se SSCHI	předseda SSCHI

4	Jiří Hanika	Pamětný list k 60. výročí chemického inženýrstva na Slovensku	spolupráce s Ústavem chem. a environmentálního inženýrstva (ÚCHEI) FCHPT STU Bratislava	ředitel ÚCHEI
5	Petr Uchytíl	Eni Award v kategorii The Protection of the Environment Prize	za soubor prací týkajících se separace plyných binárních směsí s cílem odstranit oxid uhličitý	Italian oil and gas company (ENI)
6	Pavel Krystyník	Velká cena Ekomonitoru	nejlepší přednesený referát	hodnotitelská komise Ekomonitoru

IV. Hodnocení další a jiné činnosti

ÚCHP neprováděl další ani jinou činnost.

V. Informace o opatřeních k odstranění nedostatků v hospodaření a zpráva, jak byla splněna opatření k odstranění nedostatků uložená v předchozím roce

V roce 2012 ani v předchozích letech nebyly při kontrolách shledány nedostatky v hospodaření.

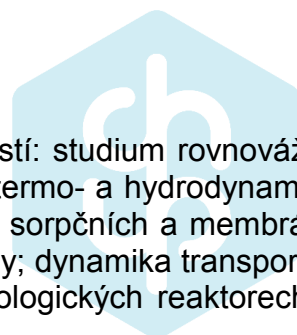
VI. Finanční informace o skutečnostech, které jsou významné z hlediska posouzení hospodářského postavení instituce a mohou mít vliv na její vývoj

ÚCHP hospodařil v roce 2012 s vyrovnaným rozpočtem. Audit za rok 2012 byl proveden firmou DILIGENS s. r. o., s tímto výrokem auditora: „Podle našeho názoru účetní závěrka podává věrný a poctivý obraz aktiv a pasiv Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i. k 31.12. 2012, nákladů a výnosů a výsledku jejího hospodaření za rok končící 31.12. 2012 v souladu s českými účetními předpisy.“ (Zpráva auditora o ověření účetní uzávěrky je v příloze.)

Výsledky „Hodnocení výzkumné činnosti vědeckých útvarů ústavu za období 2005-2009“ (kategorie pro financování Ib, koeficient 1,335) se také promítly do návrhu institucionálního financování na rok 2013 i roky následující. V rozpočtu AV ČR a jeho rozpisu na pracoviště na rok 2013, který byl schválen Akademickým sněmem AV ČR na jeho 41. zasedání dne 13. 12. 2012, se počítá pro ÚCHP s institucionální podporou přibližně 67,9 mil. Kč, tj. ve srovnání s rokem 2012 (67,4 mil. Kč) je podobná.

VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště

Hlavní směry výzkumu lze i nadále roztrždit do následujících oblastí: studium rovnovážného chování vícefázových soustav s chemickými reakcemi a aerosolů; termo- a hydrodynamika vícefázových systémů za extrémních podmínek; základy extrakčních, sorpčních a membránových separačních procesů a procesů využívajících superkritické tekutiny; dynamika transportních procesů v chemických, elektrochemických, spalovacích a biotechnologických reaktorech;



objasnění mechanismů katalyzovaných reakcí a destrukčních reakcí toxických organických látek; příprava nových materiálů reakcemi indukovanými UV/Vis, mikrovlnným či laserovým zářením.

Výzkumné výsledky, získané v rámci projektů výzkumu a vývoje, budou navazovat na uvedený výzkumný záměr s cílem získání dostatečné finanční podpory z veřejných či soukromých zdrojů.

Výzkumná témata a projekty řešené v ÚCHP jsou na výši doby a lze říci, že ústav má solidní perspektivu. Ve všech výzkumných útvarech jsou „kmenoví“ pracovníci, kteří jsou plně zapojeni do mezinárodního dění v příslušném oboru a úspěšně soutěží o účelovou finanční podporu. Příslibem do budoucna jsou nepochybně doktorandi a další mladí kolegové a kolegyně, kteří na jejich práci navazují. Dále bude pokračovat aktivní partnerská spolupráce s fakultami vysokých škol a univerzit příbuzného zaměření především v postgraduálním studiu, ale i ve snaze o uplatnění výsledků výzkumu v praktických aplikacích. Nejdůležitější podmínkou bude to, jak se podaří v budoucnu získávat doktorandy v akreditovaných oborech fakult (především VŠCHT, UK) a také mladé kolegy a kolegyně nejen v rámci tuzemska (v závislosti na počtu a kvalitě absolventů VŠ studia v oborech relevantních pro ÚCHP), ale i ze zahraničí.

VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí

ÚCHP zajišťuje ekologickou likvidaci použitých chemikálií z laboratoří ústavu (akreditovanou externí firmou na smluvním základě), třídění odpadů a úpravu a péči o zeď v areálu ústavů AV ČR Praha 6 – Lysolaje. V oblasti vodního hospodářství, při nakládání s odpadními vodami, postupuje ÚCHP v souladu s příslušným kanalizačním řádem (který je prověřován Českou inspekcí životního prostředí).

Aktivity ÚCHP v oblasti ochrany životního prostředí vyhovují zákonným normám platným pro tuto oblast (zejména zákonu 185/2001 Sb.). Energetickou náročnost vytápění ústav snižuje mj. postupnou výměnou oken ve všech budovách a postupným zateplováním poloprodučních hal.

V rámci své hlavní činnosti řeší ÚCHP společensky významné projekty výzkumu a vývoje, které směřují k přímým aplikacím v oblasti ochrany životního prostředí. Jsou to především tato témata:

- návrh nové technologie pro recyklaci prvků vzácných zemin z luminoforů použitých TV obrazovek a monitorů počítačů,
- vypracování technologie recyklace (získání monomerních složek) z materiálu odpadních PET lahví a PU pěn,
- kontinuální měření úrovně aerosolů v ovzduší areálu AV ČR Praha 6 – Lysolaje a jeho porovnání s referenční stanicí v Košetících na Vysočině.



IX. Aktivity v oblasti pracovněprávních vztahů

Pracovněprávní vztahy jsou v souladu s Kolektivní smlouvou s Odborovou organizací ÚČHP AV ČR uzavřenou dne 2.1. 2007.

V ÚČHP bylo k 31. 12. 2012 zaměstnáno 180 zaměstnanců, z toho 65 žen. Průměrný stav za rok 2012 vyjádřený ve fyzických osobách byl 183,02 a v přepočtu na plné úvazky zaměstnanců (full-time equivalent, FTE) pak 152,02.

Počty zaměstnanců v jednotlivých kategoriích jsou uvedeny v tabulce:

Kategorie	Prům. fyzic. osob	Prům. přep. úvazků	Fyzických osob k 31. 12. 2012	Z toho ženy
Vědecký pracovník	77,56	65,67	77	16
Odb. prac.VŠ ve výzkumu (OVŠ)	65,11	49,70	64	32
Odb. prac. VŠ mimo výzkum	3,00	3,00	3	1
Odb. prac. SŠ ve výzkumu (OSŠ)	9,47	6,27	8	6
Odb. prac. mimo výzkum	2,00	2,00	2	1
THP	14,83	14,33	14	9
Dělnické profese	11,05	11,05	12	0
Celkem	183,02	152,02	180	65

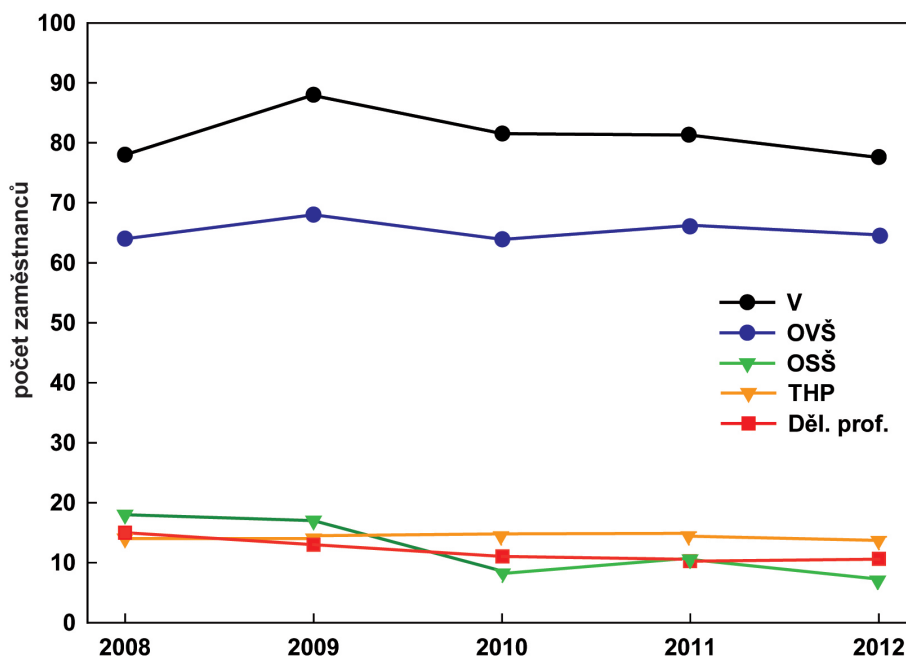
Další tabulka dokládá dlouhodobý vývoj v počtu pracovníků přepočtený na plný úvazek. Pokles mezi roky 2008 až 2010 byl způsoben zavedením nezbytných úsporných opatření. Dále tabulka zachycuje vývoj některých dalších ekonomických ukazatelů vztažených na jednoho pracovníka v průběhu posledních 5 let:

Ukazatel	2008	2009	2010	2011	2012
Přepočtený počet pracovníků (FTE)	167,86	163,19	154,43	153,50	152,02
Průměrný plat v Kč / měsíc	30 664	33 932	35 735	37 772	35 664
Průměrné náklady na 1 pracovníka v tis. Kč:					
Osobní náklady	523	568	601	634	592
Věcné náklady	467	613	610	620	517
Náklady na energie	30	34	36	34	39
Cestovné	31	33	36	32	24

Vývoj struktury zaměstnanců ÚČHP dle kategorií v letech 2008-2012 ukazuje následující graf, ze kterého je zřejmé, že počet vědeckých pracovníků (V) v uvedeném období nejprve

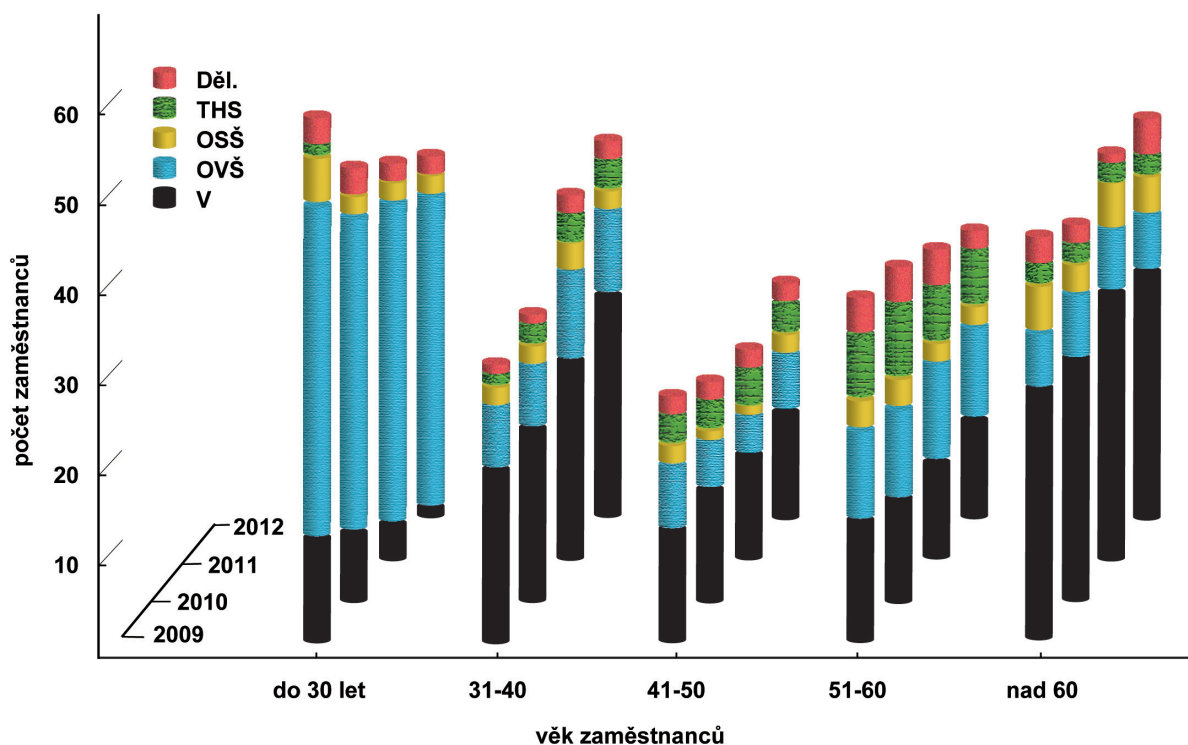
narůstal, ale zavedením nezbytných úsporných opatření v roce 2010 nadále stále mírně klesá. V kategoriích **OVŠ** a **OSŠ** je vidět mírný pokles pracovníků (odchody do důchodu), v ostatních kategoriích (**THP**, **D**) počet spíše stagnoval.

Počty zaměstnanců ÚČHP dle kategorií v letech 2008-2012

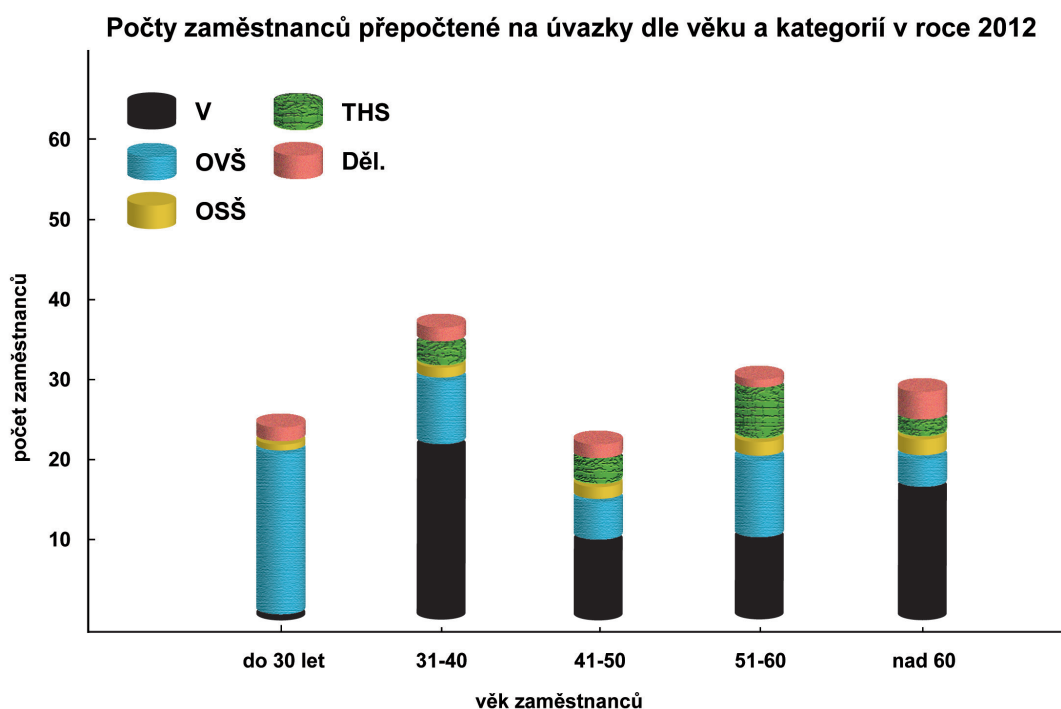


Následující obrázek odráží trendy ve věkové struktuře zaměstnanců ÚČHP v letech 2009-2012. Zavedením nezbytných úsporných opatření od prosince 2009 se celkově snížil počet zaměstnanců, pokles v kategorii do 30 let je způsoben odchodem doktorandů po absolvování studia. Výrazně je však vidět pozitivní nárůst v kategorii 31-40 let.

Počty zaměstnanců dle věku a kategorií (2009-2012)



Je taktéž zřejmé, že se podařilo obrátit trend ve věkové struktuře pracovníků ÚCHP; začaly se snižovat počty pracovníků v nejstarších věkových kategoriích, zatímco významně narůstají počty mladých pracovníků. Z následujícího obrázku je vidět, že zmíněný trend je ještě výraznější pro počty zaměstnanců přepočtené na plné úvazky:



Věková struktura a počet zaměstnanců v r. 2012:

Věk	Věd. prac.		OVŠ		OSŠ		THP		Dělníci	
	muži	ženy	muži	ženy	muži	ženy	muži	ženy	muži	ženy
do 30	0/0	1/0,25	17/10,4	19/12,83	1/0,1	1/0,72	0	0	2/2	0
31-40	18/16,42	7/8,15	7/6,65	2/2,31	1/1,13	1/0,3	2/2	1/0,5	2/2	0
41-50	10/9,33	2/1,63	3/2,5	3/3	0	2/1,75	1/1	2/2	2/1,88	0
51-60	10/10,18	1/1	3/3	7/7,92	2/2	0	2/2,83	4/4	2/1,17	0
nad 60	23/15,63	5/3,08	4/3,45	2/0,64	0	4/2,27	0	2/2	4/4	0

V tabulce jsou uvedeny počty zaměstnanců ve fyzických osobách k 31.12. 2012 (muži, ženy) v jednotlivých kategoriích (V, OVŠ, OSŠ, THP, D) rozdělené podle věkové struktury. Pro ilustraci jsou za lomítkem zaneseny i průměrné počty zaměstnanců přepočtené na úvazky.

Personální změny v r. 2012:

Pracovní poměr ukončilo 14 zaměstnanců (5 dohodou, 1 výpovědí zaměstnance, 1 z organizačních důvodů a 7 uplynutím sjednané doby). Důvodem ukončených pracovních poměrů byla změna zaměstnání nebo u mimopražských návrat do místa trvalého bydliště (převážně u doktorandů, kteří absolvovali čtyřleté doktorandské studium, nebo předčasné

ukončení studia) a odchod do starobního důchodu. 10 zaměstnanců z celkového počtu ukončených pracovních poměrů spadá do kategorie vysokoškolsky vzdělaných pracovníků pracujících ve výzkumu (prům. věk 50 let), 2 do kategorie odborných pracovníků se SŠ vzděláním pracujících ve výzkumu (prům. věk 26 let), dále pak 2 zaměstnanci servisních útvarů (prům. věk 51 let).

Do pracovního poměru nastoupilo 9 nových zaměstnanců. V kategorii vysokoškolsky vzdělaných pracovníků ve výzkumu bylo přijato na základě výběrového řízení 7 osob (prům. věk 28 let). Jedná se většinou o doktorandy na částečný úvazek a mladé výzkumné pracovníky. 2 zaměstnanci, z toho 1 laborant, byl přijat na částečný úvazek jako výpomoc a 1 dělník do stálého pracovního poměru.

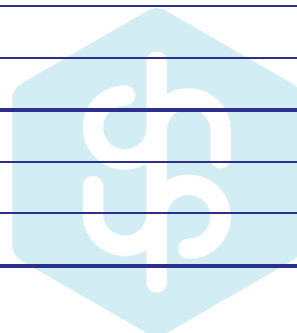
Práce, které nebylo možno provést ve stálých pracovních poměrech, byly zajišťovány uzavíráním dohod o pracích konaných mimo pracovní poměr. Na základě takto uzavřených smluv pracovalo v r. 2012 celkem 66 osob, které odpracovaly celkem 7 754 hodin.

V průběhu roku 2012 doporučila atestační komise přeřadit 1 pracovníka z kvalifikačního stupně 3a (postdoktorand) do kvalifikačního stupně 4 (vědecký pracovník) a 1 pracovníka z kvalifikačního stupně 4 (vědecký pracovník) do kvalifikačního stupně 5 (vedoucí vědecký pracovník).

ÚCHP jako školící pracoviště doktorských studijních programů:

ÚCHP AV ČR je školícím pracovištěm řady doktorských studijních programů, ve kterých je akreditován společně s fakultami VŠCHT Praha a Přírodovědeckou fakultou UK v Praze. Většina udělených akreditací je osmiletých s platností do roku 2016 nebo 2017 v závislosti na oboru. V roce 2011 byla nově udělena akreditace na VŠCHT pro doktorský studijní program „Syntéza a výroba léčiv“ se studijním oborem „Léčiva a biomateriály“ do 31.8.2015. Všechny akreditované studijní obory jsou uvedeny v tabulce:

VŠ	Akreditované studijní obory
FCHT VŠCHT	Organická chemie (OCH)
	Organická technologie (OT)
	Anorganická technologie (AT)
	Léčiva a biomateriály (LB)
FTOP VŠCHT	Chemie a technologie ochrany životního prostředí (CHTOŽP)
	Energetika v chemicko-technologických procesech (ECHTP)
	Chemické a energetické zpracování paliv (CHEZP)
FPBT VŠCHT	Biotechnologie (BT)
	Léčiva a biomateriály (LB)
FCHI VŠCHT	Chemické inženýrství (CHI)
	Fyzikální chemie (FCH)
	Léčiva a biomateriály (LB)
PřF UK	Anorganická chemie (ACH)
	Fyzikální chemie (FCH)
	Organická chemie (OCH)



V těchto oborech vědečtí pracovníci ÚCHP AV ČR pravidelně a úspěšně školí doktorandy. V několika dalších oborech, ve kterých ÚCHP zatím akreditován není, jsou naši pracovníci školiteli doktorandů v případech, kdy vědecká rada příslušné fakulty (mající v oboru akreditaci) schválí pracovníka ÚCHP v pozici školitele. Několik doktorandů, kteří připravují své doktorské práce na ÚCHP, má školitele na příslušné fakultě VŠ, pracovník ÚCHP pak plní úlohu školitele-specialisty.

Z celkového počtu 38 doktorandů bylo k 31.12. 2012 školen 28 formou prezenčního studia a 10 kombinovanou formou. V roce 2012 bylo nově přijato 7 studentů prezenční a 2 kombinované formy studia. Z celkového počtu je 1 student cizí státní příslušnosti (Rusko).

Bažantova konference doktorandů se konala 7.6. 2012; za své prezentace bylo oceněno 8 doktorandů.

V roce 2012 ukončilo 8 doktorandů své studium: 6 obhajobou disertační práce a 2 ukončili předčasně studium na vlastní žádost.

Ubytování a byty:

Ubytovacích služeb ubytoven AV ČR v Praze 6 - Sedlci využilo v roce 2012 celkem 5 zaměstnanců (PhD studenti a výzkumní pracovníci).

V roce 2012 měli výzkumní pracovníci ústavu v užívání celkem 9 služebních bytů, z toho 7 startovacích služebních bytů je v Praze 6 – Lysolajích. 1 služební byt byl nově přidělen.

ÚSTAV CHEMICKÝCH PROCESŮ AV ČR, v. v. i.
165 02 Praha 6 - Suchbát, Rozvojová 135
IČO: 67985858 DIČ: CZ67985858

- 1 -

razítko

Ing. Miroslav PUNČOCHÁŘ, DSc.
ředitel

.....
podpis ředitele pracoviště AV ČR





**Zpráva auditora
o ověření účetní závěrky**

za rok 2012

Příjemce zprávy: statutární orgán Ústavu chemických procesů AV ČR,
v. v. i.
ředitel Ing. Miroslav Punčochář, CSc., DSc.



Název instituce: Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i.

zapsána: v rejstříku veřejných výzkumných institucí, vedeného Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy

Sídlo: Rozvojová 135, Praha 6, 165 02

Právní forma: veřejná výzkumná instituce

IČ instituce: 679 85 858

DIČ instituce: CZ67985858

**Období, za které
bylo ověření provedeno:** účetní rok 2012

Předmět a účel ověření: roční účetní závěrka za rok 2012 ve smyslu ustanovení zákona č. 93/2009 Sb., o auditorech a v souladu s Mezinárodními předpisy v oblasti řízení kvality, auditu, prověrek, ostatních ověřovacích zakázek a souvisejících služeb



ZPRÁVA NEZÁVISLÉHO AUDITORA

Provedli jsme audit přiložené účetní závěrky Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i., která se skládá z rozvahy k 31. 12. 2012, výkazu zisku a ztráty za rok končící 31. 12. 2012 a přílohy této účetní závěrky, která obsahuje popis použitých podstatných účetních metod a další vysvětlující informace. Údaje o Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i. jsou uvedeny v příloze této účetní závěrky.

Odpovědnost statutárního orgánu účetní jednotky za účetní závěrku

Statutární orgán Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i. je odpovědný za sestavení účetní závěrky, která podává věrný a poctivý obraz v souladu s českými účetními předpisy, a za takový vnitřní kontrolní systém, který považuje za nezbytný pro sestavení účetní závěrky tak, aby neobsahovala významné (materiální) nesprávnosti způsobené podvodem nebo chybou.

Odpovědnost auditora

Naši odpovědností je vyjádřit na základě našeho auditu výrok k této účetní závěrce. Audit jsme provedli v souladu se zákonem o auditorech, mezinárodními auditorskými standardy a souvisejícími aplikačními doložkami Komory auditorů České republiky. V souladu s těmito předpisy jsme povinni dodržovat etické požadavky, naplánovat a provést audit tak, abychom získali přiměřenou jistotu, že účetní závěrka neobsahuje významné (materiální) nesprávnosti.

Audit zahrnuje provedení auditorských postupů k získání důkazních informací o částkách a údajích zveřejněných v účetní závěrce. Výběr postupů závisí na úsudku auditora, zahrnujícím i vyhodnocení rizik významné (materiální) nesprávnosti údajů uvedených v účetní závěrce způsobené podvodem nebo chybou. Při vyhodnocování těchto rizik auditor posoudí vnitřní kontrolní systém relevantní pro sestavení účetní závěrky podávající věrný a poctivý obraz. Cílem tohoto posouzení je navrhnout vhodné auditorské postupy, nikoli vyjádřit se k účinnosti vnitřního kontrolního systému účetní jednotky. Audit též zahrnuje posouzení vhodnosti použitých účetních metod, přiměřenosti účetních odhadů provedených vedením i posouzení celkové prezentace účetní závěrky.

Jsme přesvědčeni, že důkazní informace, které jsme získali, poskytují dostatečný a vhodný základ pro vyjádření našeho výroku.



Výrok auditora

Podle našeho názoru účetní závěrka podává věrný a poctivý obraz aktiv a pasiv Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i. k 31. 12. 2012, nákladů a výnosů a výsledku jejího hospodaření za rok končící 31. 12. 2012 v souladu s českými účetními předpisy.

Ing. Pavla Císařová, CSc.
auditor, č. oprávnění 1498



DILIGENS s.r.o.
Severozápadní III. 367/32,
141 00 Praha 4 – Spořilov
číslo auditorského oprávnění: 196

V Praze dne 7. května 2013

Příloha:

- Rozvaha sestavena dle vyhl. 504/2002 Sb. ve znění pozdějších předpisů k 31.12.2012
- Výkaz zisku a ztráty sestavený dle vyhl. 504/2002 Sb., ve znění pozdějších předpisů k 31.12.2012
- Příloha k účetní závěrce sestavena dle vyhl. 504/2002 Sb., ve znění pozdějších předpisů k 31.12.2012

Zřizovatel: Akademie věd ČR

Rozvaha

(v tis. Kč)

sestavena dle vyhl. 504/2002 Sb., ve znění pozdějších předpisů

k 31.12.2012

Název účetní jednotky:

Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i.

Sídlo:

Rozvojová 135, 160 00 Praha 6

IČ:

67985858

A	Název	SÚ	čís. řád.	Stav	
				Stav k 01.01.12	Stav k 31.12.12
A	Dlouhodobý majetek celkem			188 357	182 177
I.	Dlouhodobý nehmotný majetek celkem	1	1	3 566	3 029
	1. Nehmotné výsledky výzkumu a vývoje	012	2	0	0
	2. Software	013	3	2 547	2 315
	3. Ocenitelná práva	014	4	0	0
	4. Drobný dlouhodobý nehmotný majetek	018	5	1 019	714
	5. Ostatní dlouhodobý nehmotný majetek	019	6	0	0
	6. Nedokončený dlouhodobý nehmotný majetek	041	7	0	0
	7. Poskytnuté zálohy na dlouhodobý nehmotný majetek	051	8	0	0
II.	Dlouhodobý hmotný majetek celkem	02+03	9	407 210	416 758
	1. Pozemky	031	10	122 718	122 713
	2. Umělecká díla, předměty, sbírky	032	11	0	0
	3. Stavby	021	12	77 842	78 421
	4. Samostatné movité věci a soubory movitých věcí	022	13	187 962	198 671
	5. Pěstitelské celky trvalých porostů	025	14	0	0
	6. Základní stádo a tažná zvířata	026	15	0	0
	7. Drobný dlouhodobý hmotný majetek	028	16	18 688	16 953
	8. Ostatní dlouhodobý hmotný majetek	029	17	0	0
	9. Nedokončený dlouhodobý hmotný majetek	042	18	0	0
	10. Poskytnuté zálohy na dlouhodobý hmotný majetek	052	19	0	0
III.	Dlouhodobý finanční majetek celkem	6	20	0	0
	1. Podíly v ovládaných a řízených osobách	061	21	0	0
	2. Podíly v osobách pod podstatným vlivem	062	22	0	0
	3. Dluhové cenné papíry	063	23	0	0
	4. Půjčky organizačním složkám	066	24	0	0
	5. Ostatní dlouhodobé půjčky	067	25	0	0
	6. Ostatní dlouhodobý finanční majetek	069	26	0	0
	7. Pořizovaný dlouhodobý finanční majetek	043	27	0	0
IV	Oprávky k dlouhodobému majetku celkem	07 - 08	28	-222 419	-237 610
	1. Oprávky k nehmotným výsledkům výzkumu a vývoje	072	29	0	0
	2. Oprávky k softwaru	073	30	-2 166	-2 128
	3. Oprávky k ocenitelným právům	074	31	0	0
	4. Oprávky k drobnému dlouhodobému nehmotnému majetku	078	32	-1 019	-714
	5. Oprávky k ostatnímu dlouhodobému nehmotnému majetku	079	33	0	0
	6. Oprávky ke stavbám	081	34	-46 969	-50 581
	7. Oprávky k samostatným movitým věcem a souborům movitých věcí	082	35	-153 577	-167 234
	8. Oprávky k pěstitelským celkům trvalých porostů	085	36	0	0
	9. Oprávky k základnímu stádu a tažným zvířatům	086	37	0	0
	10. Oprávky k drobnému dlouhodobému hmotnému majetku	088	38	-18 688	-16 953
	11. Oprávky k ostatnímu dlouhodobému hmotnému majetku	089	39	0	0

B.		Krátkodobý majetek celkem		40	13 151	20 769
I.	Zásoby celkem	11-13	41		1 464	1 383
	1. Materiál na skladě	112	42		1 461	1 382
	2. Materiál na cestě	111,119	43		0	0
	3. Nedokončená výroba	121	44		0	0
	4. Polotovary vlastní výroby	122	45		0	0
	5. Výrobky	123	46		0	0
	6. Zvířata	124	47		0	0
	7. Zboží na skladě a v prodejnách	132	48		3	1
	8. Zboží na cestě	131,139	49		0	0
	9. Poskytnuté zálohy na zásoby		50		0	0
II.	Pohledávky celkem	31-39	51		4 597	3 117
	1. Odběratelé	311	52		626	640
	2. Směnky k inkasu	312	53		0	0
	3. Pohledávky za eskontované cenné papíry	313	54		0	0
	4. Poskytnuté provozní zálohy	314	55		215	147
	5. Ostatní pohledávky	316	56		21	40
	6. Pohledávky z a zaměstnanci	335	57		207	204
	7. Pohledávky z institucemi sociálního zabezpečení a VZP	336	58		0	0
	8. Daň z příjmů	341	59		0	38
	9. Ostatní přímé daně	342	60		0	0
	10. Daň z přidané hodnoty	343	61		0	0
	11. Ostatní daně a poplatky	345	62		393	116
	12. Nároky na dotace a ostatní zúčtování se státním rozpočtem	346	63		0	0
	13. Nároky na dotace a ostatní zúčtování s rozpočtem orgánů Úx		64		0	0
	14. Pohledávky za účastníky sdružení	358	65		0	0
	15. Pohledávky z pevných termínových operací	373	66		0	0
	16. Pohledávky z vydaných dluhopisů	375	67		0	0
	17. Jiné pohledávky	378	68		22	326
	18. Dohadné účty aktivní	388	69		3 113	1 606
	19. Opravná položka k pohledávkám	391	70		0	0
III.	Krátkodobý finanční majetek celkem	21 - 26	71		5 824	13 969
	1. Pokladna	211	72		52	43
	2. Ceniny	212	73		0	0
	3. Účty v bankách	221	74		5 772	13 926
	4. Majetkové cenné papíry k obchodování	251	75		0	0
	5. Dluhové cenné papíry k obchodování	253	76		0	0
	6. Ostatní cenné papíry	256	78		0	0
	7. Pořízený krátkodobý finanční majetek	259	79		0	0
	8. Peníze na cestě	262	80		0	0
IV.	Jiná aktiva celkem	38	81		1 266	2 300
	1. Náklady příštích období	381	82		1 266	2 300
	2. Příjmy příštích období	385	83		0	0
	3. Kurzové rozdíly aktivní	386	84		0	0
A+B	Aktiva celkem		85		201 508	202 946

A		Vlastní zdroje celkem		86	192 907	191 904
I.	Jmění celkem	90-92	87	192 514	191 508	
	1. Vlastní jmění	901	88	188 357	182 177	
	2. Fondy	91	89	4 157	9 331	
	- Sociální fond	912		763	894	
	- Rezervní fond	914		108	501	
	- Fond účelově určených prostředků	915		2 958	7 671	
	- Fond reprodukce majetku	916		328	265	
	3. Oceňovací rozdíly z přecenění majetku a závazků	920	90	0	0	
II.	Výsledek hospodaření celkem	93-96	91	393	396	
	1. Účet výsledku hospodaření	963	92	0	396	
	2. Výsledek hospodaření ve schvalovacím řízení	931	93	393	0	
	3. Nerozdělený zisk, neuhrazená ztráta minulých let	932	94	0	0	
B.	Cizí zdroje celkem		95	8 601	11 042	
I.	Rezervy celkem	94	96	0	0	
	1. Rezervy	941	97	0	0	
II.	Dlouhodobé závazky celkem	38, 95	98	0	0	
	1. Dlouhodobé bankovní úvěry	951	99	0	0	
	2. Vydané dluhopisy	953	100	0	0	
	3. Závazky z pronájmu	954	101	0	0	
	4. Přijaté dlouhodobé zálohy	952	102	0	0	
	5. Dlouhodobé směnky k úhradě	x	103	0	0	
	6. Dohadné účty pasivní	387	104	0	0	
	7. Ostatní dlouhodobé závazky	958	105	0	0	
III.	Krátkodobé závazky celkem	28, 32-	106	8 597	11 042	
	1. Dodavatelé	321	107	694	679	
	2. Směnky k úhradě	322	108	0	0	
	3. Přijaté zálohy	324	109	0	0	
	4. Ostatní závazky	325	110	0	0	
	5. Zaměstnanci	331	111	0	4 970	
	6. Ostatní závazky vůči zaměstnancům	333	112	4 056	0	
	7. Závazky k institucím sociálního zabezpečení a VZP	336	113	2 418	2 951	
	8. Daň z příjmů	341	114	0	0	
	9. Ostatní přímé daně	342	115	679	909	
	10. Daň z přidané hodnoty	343	116	522	1 020	
	11. Ostatní daně a poplatky	345	117	0	0	
	12. Závazky ze vztahu k státnímu rozpočtu	347	118	0	0	
	13. Závazky ze vztahu k rozpočtu ÚSC	x	119	0	0	
	14. Závazky z upsaných nesplacených cenných papírů a podílů	367	120	0	0	
	15. Závazky k účastníkům sdružení	368	121	0	0	
	16. Závazky z pevných termínových operací a opcí	373	122	0	0	
	17. Jiné závazky	379	123	176	483	
	18. Krátkodobé bankovní úvěry	281	124	0	0	
	19. Eskontní úvěry	282	125	0	0	
	20. Vydané krátkodobé dluhopisy	283	126	0	0	
	21. Vlastní dluhopisy	284	127	0	0	
	22. Dohadné účty pasivní	389	128	52	30	
	23. Ostatní krátkodobé finanční výpomoci	289	129	0	0	
IV.	Jiná pasiva celkem	38	130	4	0	
	1. Výdaje příštích období	383	131	0	0	
	2. Výnosy příštích období	384	132	0	0	
	3. Kurzové rozdíly pasivní	387	133	4	0	
A+B	Pasiva celkem		134	201 508	202 946	

Předmět činnosti:
Vědecký výzkum a vývoj v oblasti teorie chemických procesů
Rozvahový den: 31.12.2012

Datum sestavení: 06.05.2013

Odesláno dne: 06.05.2013

Eva Krejčíková, Jiří Caha
podpis a jméno
sestavil

Ing. Miroslav Punčochář, CSc., DSc.
podpis a jméno
otisk razítka
odpovědné osoby

ÚSTAV CHEMICKÝCH PROCESŮ AV ČR, v. v. i.
165 02 Praha 6 - Suchbátův Rozvojová 135
IČO: 67985858 DIČ: CZ67985858

- 3 -

Zřizovatel: Akademie věd ČR

Výkaz zisku a ztráty

(v tis. Kč)

sestavený dle vyhl. 504/2002 Sb., ve znění pozdějších předpisů

k 31.12.2012

Název účetní jednotky:

Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i.

Sídlo:

Rozvojová 135, 160 00 Praha 6

IČ:

67985658

	Název ukazatele	SÚ	čís. řád.	Činnost	
				hlavní	hospodářská
				1	2
A.	Náklady		1	168 540	0
I.	Spotřebované nákupy celkem	50	2	18 935	0
	1. Spotřeba materiálu	501	3	13 040	0
	2. Spotřeba energie	502	4	2 289	0
	3. Spotřeba ostatních neskladovatelných dodávek	503	5	3 606	0
	4. Prodané zboží	504	6	0	0
II.	Služby celkem	51	7	30 491	0
	5. Opravy a udržování	511	8	16 066	0
	6. Cestovné	512	9	3 655	0
	7. Náklady na reprezentaci	513	10	221	0
	8. Ostatní služby	518, 514	11	10 549	0
III.	Osobní náklady celkem	52	12	89 931	0
	9. Mzdové náklady	521	13	65 445	0
	10. Zákonné sociální pojištění	524	14	21 896	0
	11. Ostatní sociální pojištění	525	15	0	0
	12. Zákonné sociální náklady	527	16	1 277	0
	13. Ostatní sociální náklady	528	17	1 313	0
IV.	Daně a poplatky celkem	53	18	224	0
	14. Daň silniční	531	19	12	0
	15. Daň z nemovitostí	532	20	4	0
	16. Ostatní daně a poplatky	538	21	208	0
V.	Ostatní náklady celkem	54	22	10 168	0
	17. Smluvní pokuty a úroky z prodlení	541	23	0	0
	18. Ostatní pokuty a penále	542	24	2	0
	19. Odpis nedobytné pohledávky	543	25	3	0
	20. Úroky	544	26	0	0
	21. Kurzové ztráty	545	27	236	0
	22. Dary	546	28	0	0
	23. Manka a škody	548	29	0	0
	24. Jiné ostatní náklady	549	30	9 927	0
VI.	Odpisy, prodaný majetek, tvorba rezerv a opr.položek celkem	55	31	18 791	0
	25. Odpisy dlouhodobého nehmotného a hmotného majetku	551	32	18 791	0
	26. Zůstatková cena prodaného DNM a DHM	552	33	0	0
	27. Prodané cenné papíry a podíly	553	34	0	0
	28. Prodaný materiál	554	35	0	0
	29. Tvorba rezerv	556	36	0	0
	30. Tvorba opravných položek	559	37	0	0
VII.	Poskytnuté příspěvky celkem	58	38	0	0
	31. Poskytnuté příspěvky zúčtované mezi organizačními složkami	x	39	0	0
	32. Poskytnuté členské příspěvky	581	40	0	0
VIII.	Daň z příjmů celkem	59	41	0	0
	33. Dodatečné odvody daně z příjmů	595	42	0	0

	Název ukazatele	SÚ	čís. řád.	Činnost	
				hlavní	hospodářská
				1	2
B.	Výnosy		1	169 030	0
I.	Tržby za vlastní výkony a za zboží celkem	60	2	2 665	0
	1. Tržby za vlastní výroby	601	3	0	0
	2. Tržba z prodeje služeb	602	4	2 665	0
	3. Tržba za prodané zboží	604	5	0	0
II.	Změny stavu vnitroorganizačních zásob celkem	61	6	0	0
	4. Změna stavu zásob nedokončené výroby	611	7	0	0
	5. Změna stavu zásob polotovarů	612	8	0	0
	6. Změna stavu zásob výrobků	613	9	0	0
	7. Změna stavu zvířat	614	10	0	0
III.	Aktivace celkem	62	11	0	0
	8. Aktivace materiálu a zboží	621	12	0	0
	9. Aktivace vnitroorganizačních služeb	622	13	0	0
	10. Aktivace dlouhodobého nehmotného majetku	623	14	0	0
	11. Aktivace dlouhodobého hmotného majetku	624	15	0	0
IV.	Ostatní výnosy celkem	64	16	24 093	0
	12. Smluvní pokuty a úroky z prodlení	641	17	0	0
	13. Ostatní pokuty a penále	642	18	0	0
	14. Platby za odepsané pohledávky	643	19	0	0
	15. Úroky	644	20	4	0
	16. Kurzové zisky	645	21	4	0
	17. Zúčtování fondů	648	22	4 204	0
	18. Jiné ostatní výnosy	649	23	19 881	0
V.	Tržby z prodeje majetku, zúčt. rezerv a oprav. položek celkem	65	24	0	0
	19. Tržby z prodeje DNM a DHM	651	25	0	0
	20. Tržby z prodeje cenných papírů a podílů	653	26	0	0
	21. Tržby z prodeje materiálu	654	27	0	0
	22. Výnosy z krátkodobého finančního majetku	655	28	0	0
	23. Zúčtování rezerv	656	29	0	0
	24. Výnosy z dlouhodobého finančního majetku	657	30	0	0
	25. Zúčtování opravných položek	659	31	0	0
VI.	Přijaté příspěvky celkem	68	32	0	0
	26. Přijaté příspěvky zúčtované mezi organizačními složkami		33	0	0
	27. Přijaté příspěvky (dary)	681	34	0	0
	28. Přijaté členské příspěvky		35	0	0
VII.	Provozní dotace celkem	69	36	142 272	0
	29. Provozní dotace	691	37	142 272	0
C.	Výsledek hospodaření před zdaněním		38	490	0
	34. Daň z příjmů	591	39	94	0
D.	Výsledek hospodaření po zdanění		40	396	0

Předmět činnosti:
Vědecký výzkum a vývoj v oblasti teorie chemických procesů
Rozvahový den: 31.12.2012

Datum sestavení: 06.05.2013

Odesláno dne: 06.05.2013

Eva Krejčíková, Jiří Čaha
podpis a jméno
sestavil

Ing. Miroslav Punčochář, CSc., DSc.
podpis a jméno
odpovědné osoby
otisk razítka

ÚSTAV CHEMICKÝCH PROCESŮ AV ČR, v. v. i.
165 02 Praha 6 - Suchbátův Rozvojová 135
IČO: 67985858 DIČ: CZ67985858

- 3 -

Příloha k účetní závěrce 2012

A. Popis účetní jednotky

Účetní jednotka: Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i.

Sídlo: Praha 6, Rozvojová 135

IČ: 67985858

DIČ: CZ 67985858

Právní forma: veřejná výzkumná instituce (v. v. i.)

Rozvahový den: 31. 12. 2012

Sestavil účetní závěrku: Ing. Zdeněk Novák, Jiří Caha

Datum sestavení:

Účel vzniku:

Předmětem hlavní činnosti ÚCHP je vědecký výzkum a vývoj v oblasti teorie chemických procesů, zejména v oborech chemického inženýrství, fyzikální chemie a bioinženýrství, zaměřený zvláště na chemickou a statistickou termodynamiku, separační procesy, katalýzu, reaktorové inženýrství, aplikovanou organokovovou chemii, vícefázové chemické reaktory a bioreaktory, biotechnologie a technologie procesů pro životní prostředí, dále pak na chemické reakce iniciované, resp. urychlované laserovým, resp. mikrovlnným zářením a na procesy tvorby a přeměn aerosolů. Ústav přispívá ke zvyšování úrovně poznání a vzdělanosti a k využití výsledků vědeckého výzkumu v praxi. Získává, zpracovává a rozšiřuje vědecké informace, vydává vědecké publikace (monografie, časopisy, sborníky apod.), poskytuje vědecké posudky, stanoviska a doporučení a provádí konzultační a poradenskou činnost. V oborech své vědecké činnosti provádí analýzy, testování a měření charakteristických vlastností chemických látek a materiálů, vyvíjí software a speciální a unikátní vědecké přístroje, zařízení i součásti zařízení do úrovně prototypů, ověřovacích a nultých sérií. Ve spolupráci s vysokými školami uskutečňuje doktorské studijní programy a vychovává vědecké pracovníky. V rámci předmětu své činnosti rozvíjí mezinárodní spolupráci, včetně organizování společného výzkumu se zahraničními partnery, přijímání a vysílání stážistů, výměny vědeckých poznatků a přípravy společných publikací. ÚCHP pořádá vědecká setkání, konference a semináře, včetně mezinárodních, a zajišťuje infrastrukturu pro výzkum. Úkoly realizuje samostatně i ve spolupráci s vysokými školami a dalšími vědeckými a odbornými institucemi.

B. Zřizovatel a vznik

Zřizovatelem Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i., je Akademie věd ČR. Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., vznikl ke dni 1. 1. 2007 na základě zákona č. 351/2005 Sb., o veřejných výzkumných institucích.

C. Účetní informace:

- **Účetní období:** 01. 01. 2012 – 31. 12. 2012
- **Použití účetních metod a zásady účetnictví**
Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., v roce 2012 zpracoval účetní závěrku v souladu se zákonem č. 563/1991 Sb., o účetnictví ve znění pozdějších dodatků a v souladu s vyhláškou č. 504/2002 Sb., kterou se provádějí některá ustanovení zákona č. 563/1991 Sb., o účetnictví, ve znění pozdějších předpisů, pro účetní jednotky, u kterých hlavním předmětem činnosti není podnikání, pokud účtují v soustavě podvojného účetnictví v platném znění.

Účetnictví respektuje obecné účetní zásady, především zásadu o oceňování majetku historickými cenami, zásadu účtování ve věcné a časové souvislosti, zásadu opatrnosti a předpoklad o schopnosti účetní jednotky pokračovat ve svých aktivitách. Údaje v této účetní závěrce jsou vyjádřeny v tisících korunách českých (Kč).

- **Způsoby zpracování účetních záznamů**

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., využívá pro zpracování finančního účetnictví informačně ekonomický systém iFis společnosti BBM a pro zpracování mzdového účetnictví mzdový systém společnosti Elanor.

- **Způsoby a místa úschovy účetních záznamů**

Účetní záznamy jsou zálohovány v elektronické verzi na základě servisní smlouvy uzavřené se Střediskem společných činností AV ČR, v. v. i., současně Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., uschovává účetní záznamy v tištěné podobě, kterou archivuje v souladu se zákonem o účetnictví v platném znění.

- **Způsoby oceňování a odpisování, pokud je jejich znalost významná pro posouzení finanční, majetkové situace a výsledku hospodaření účetní jednotky, odchylkách od účetních metod podle § 7 odst. 5 zákona s uvedením vlivu na majetek a závazky, na finanční situaci a výsledek hospodaření účetní jednotky**

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., odpisuje metodou lineárních rovnoměrných účetních odpisů. Výše odpisu je stanoven vnitřní směrnici. Nakoupený dlouhodobý hmotný a nehmotný majetek je oceněn pořizovací cenou sníženou o oprávků. Majetek se začíná odepisovat následující měsíc po zavedení do účetnictví.

- **Způsob tvorby a výše opravných položek a rezerv za uzavírané účetní období**

V roce 2012 Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., netvořil opravné položky a rezervy.

D. Významné události, které se staly mezi rozvahovým dnem a okamžikem sestavení účetní závěrky podle § 19 odst. 5 zákona

Mezi rozvahovým dnem a okamžikem sestavení účetní závěrky se nestaly žádné významné události.

E. Způsoby oceňování použité pro položky aktiv a závazků

K 31. 12. 2012 byl proveden přepočítání aktiv a závazků v cizí měně v kursu-střed k rozvahovému dni vyhlášeném ČNB – EUR/CZK 25,20.

F. Název jiných účetních jednotek, v nichž účetní jednotka sama nebo prostřednictvím třetí osoby (jednající jejím jménem a na její účet) drží podíl, tento podíl může být i v podobě držených akcií, s uvedením výše tohoto podílu, u akcií s uvedením počtu, jmenovité hodnoty a druhu těchto akcií, jakož i výše základního kapitálu, vlastního jmění, fondů a zisku nebo ztráty této jiné účetní jednotky za minulé období

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., nedejří žádný podíl v jakékoliv podobě.

G. Přehled splatných závazků:

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., nedejří k 31. 12. 2012 žádné závazky po splatnosti vůči ČSSZ na pojistné na sociální zabezpečení a příspěvku na státní politiku

zaměstnanosti, zdravotním pojišťovnám na veřejného zdravotního pojištění ani nemá žádné evidované daňové nedoplatky u příslušných finančních orgánů.

H. Počet a jmenovitá hodnota akcií nebo podílů, nebo nemají-li jmenovitou hodnotu, informace o jejich ocenění

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., v roce 2012 neeviduje žádné akcie či podíly.

I. Cenné papíry a dluhopisy:

- **majetkové cenné papíry**
Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., nehospodaří s žádnými majetkovými cennými papíry.
- **vyměnitelné a prioritní dluhopisy**
Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., nehospodaří s žádnými vyměnitelnými a prioritními dluhopisy.

J. Částky dlužné, které vznikly v daném účetním období a zbytková doba jejich splatnosti k rozvahovému dni přesahuje 5 let

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., neeviduje žádné dlužné částky, které vznikly v daném účetním období a zbytková doba jejich splatnosti k rozvahovému dni přesahuje 5 let. Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., neeviduje pohledávky po 180 dnech splatnosti. Po splatnosti neeviduje Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., žádné závazky.

K. Celková výše finančních nebo jiných závazků, které nejsou obsaženy v rozvaze (bilanci)

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., nemá žádné finanční nebo jiné závazky neobsažené v rozvaze v roce 2012.

L. Výsledek hospodaření v členění podle hlavní a hospodářské činnosti a pro účely daně z příjmů

V roce 2012 Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., provozoval hlavní činnost a výsledek hospodaření z této činnosti je 396,39 tis. Kč.

M. Počet pracovníků

- **průměrným evidenčním přepočtením počtu pracovníků v členění podle kategorií,**
Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., v roce 2012 eviduje 152,02 průměrných přepočtených pracovníků.

Rozbor dle kategorií pracovníků:

Kategorie	Vědecký pracovník	Odborný prac.VaV-VŠ	Odborný prac.-VŠ	Odborný prac.-SŠ	THP pracovník	Dělnické profese
-----------	-------------------	---------------------	------------------	------------------	---------------	------------------

Prům.přepočtený počet pracovníků	65,67	49,70	3,00	8,27	14,33	11,05
----------------------------------	-------	-------	------	------	-------	-------

- **osobní náklady za účetní období v členění podle výkazu zisků a ztrát u položek – mzdové náklady, ostatní sociální náklady**

Mzdové náklady	Částka v Kč
tarifní platy	40 599 958
osobní příspěvek	8 202 509
příplatek za vedení	365 265
příplatky zvláštní	-
odměny	8 545 185 + odm.ze SF výročí 14 000 = 8 559 185
náhrady mezd	6 157 483 + náhrady za nemoc 125 938 = 6 283 421
OON	1 435 038
Celkem	65 445 376

- **údaje o počtu a postavení zaměstnanců (pokud jsou zároveň členy statutárních, kontrolních nebo jiných orgánů určených statutem, stanovami nebo zřizovací listinou)**

V Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i., byl v roce 2007 na základě zákona č. 341/2005 Sb., o v. v. i., jmenován statutární zástupce, jmenována Dozorčí rada a zvolena Rada Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i. Ředitel je vedoucím vědeckým pracovníkem

- 8 interních členů Rady Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i. je voleno z řad vědeckých pracovníků
- 1 interní člen Dozorčí rady byl jmenován zřizovatelem z řad vědeckých pracovníků.

N. Ohodnocení členů statutárních a kontrolních orgánů

V roce 2012 byly stanoveny a vyplaceny odměny nebo funkční požitky členům statutárních a kontrolních orgánů:

48 000 Dozorčí rada
121 000 Rada ústavu

- O. **Účast členů (statutárních kontrolních nebo jiných orgánů účetní jednotky určených statutem, stanovami nebo jinou zřizovací listinou) a jejich rodinných příslušníků v osobách, s nimiž účetní jednotka uzavřela za vykazované účetní období obchodní smlouvy nebo jiné smluvní vztahy.**

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., neuzavřel v roce 2012 žádnou obchodní smlouvu nebo jiné smluvní vztahy s institucemi v souladu s tímto bodem.

- P. **Výše záloh a úvěrů, poskytnutých členům orgánů uvedeným v písmenu N), s uvedením úrokové sazby, hlavních podmínek a případně proplacených částkách**

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., neviduje v roce 2012 žádné zálohy a úvěry poskytnuté členům orgánů uvedených v písmenu N).

- Q. **Rozsah, ve kterém byl výpočet zisků nebo ztrát ovlivněn způsobem oceňování finančního majetku v průběhu účetního období nebo bezprostředně předcházejícího účetního období (pokud ocenění má vliv na budoucí daňovou povinnost, nutnost uvést o tom podrobnosti)**

V roce 2011 nebyl hospodářský výsledek ovlivněn způsobem oceňování finančního majetku.

R. Způsob zajištění základu daně z příjmů

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., dlouhodobě spolupracuje s daňovým poradcem, který zajišťuje zpracování daňového přiznání pro rok 2012. Při zajištění daňového základu je postupováno v souladu se zákonem č. 586/1992 Sb., zákon o dani z příjmu v platném znění a dle § 20 tohoto zákona jsou uplatňovány položky snižující základ daně.

S. Rozdíly mezi daňovou povinností připadající na běžné nebo minulé účetní období a již zaplacenou daní v těchto účetních obdobích

Není rozdíl mezi daňovou povinností připadající na běžné nebo minulé účetní období a již zaplacenou daní v těchto účetních obdobích.

T. Významné položky z rozvahy (bilance) nebo výkazu zisků a ztrát, u kterých je uvedení podstatné pro hodnocení finanční a majetkové situace a výsledku hospodaření účetní jednotky, pokud tyto informace nevyplývají přímo ani nepřímo z rozvahy (bilance) a výkazu zisků a ztrát**Rozbor dotace neinvestiční**

Zdroj	tis. Kč
Dotace institucionální celkem	79 423
Dotace účelové celkem	1 274
Ostatní zdroje (tuzemské i zahraniční)	61 575
Celkem	142 272

Rozbor dotace investiční

Zdroj	tis. Kč
Dotace institucionální celkem	11 271
Dotace účelové celkem	0
Dotace mimorozpočtové celkem	1 249
Ostatní zdroje (z prodeje majetku)	32
FRM – vlastní zdroje	0
Celkem	12 552

U. Přehled o poskytnutých darech a dárcích

V roce 2012 byl Ústavu chemických procesů AV ČR, v. v. i. poskytnut finanční dar ve výši 100 tis. Kč od společnosti ASEKOL s.r.o.

V. Přehled informací o veřejných sbírkách podle zvláštního předpisu (zákon č. 117/2001 Sb. o veřejných sbírkách) – uvedení účelu a výše vybraných částek

V roce 2012 nebyly vybírány žádné veřejné sbírky.

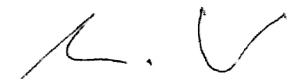
W. Způsob vypořádání výsledku hospodaření z předcházejících účetních období (rozdělení zisku)

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., vznikl k 1. 1. 2007 na základě zákona č. 351/2005 Sb., o veřejných výzkumných institucích. Výsledek hospodaření byl po schválení, v rámci v. v. i., vypořádán přezazením do rezervního fondu.

X. Další údaje (podle zvláštních právních předpisů a rozhodnutí účetní jednotky), které nejsou v příloze uvedeny, ale mají významnou vypovídající schopnost o ekonomické činnosti účetní jednotky

V roce 2012 jsou všechny podstatné údaje, jež vypovídají o ekonomické činnosti, zachyceny v předchozích bodech.

V Praze, dne 6.5.2013


Ing. Miroslav Punčochář, CSc., DSc.
ředitel ústavu

ÚSTAV CHEMICKÝCH PROCESŮ AV ČR, v. v. i.
165 02 Praha 6 - Suchbát. Rozvojevá 135
IČO: 67985858 DIČ: CZ67985858
- 3 -

