



## **Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i.**

IČ: 61388980

Sídlo: 250 68 Husinec-Řež, č. p. 1001

# **Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2014**

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 19. května 2015

Radou pracoviště schválena dne: 5. června 2015

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

### a) Výchozí složení orgánů pracoviště

Ředitelka pracoviště: Ing. Jana Bludská, CSc.  
jmenována s účinností od 1. 11. 2012 do 31. 10. 2017

Rada pracoviště zvolena dne 7. 12. 2011 ve složení:

předseda: Dr. Michael Londesborough, Ph.D, ÚACH AV ČR, v. v. i.

místopředseda: Ing. Kamil Lang, CSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

členové: Mgr. Tomáš Baše, PhD, ÚACH AV ČR, v. v. i.

prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, VŠCHT Praha

RNDr. Michal Dušek, CSc., Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i.

Mgr. David Hradil, PhD, ÚACH AV ČR, v. v. i. (do 7. 6. 2016)

Ing. Ivo Jakubec, CSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

RNDr. Mariana Klementová, PhD, ÚACH AV ČR, v. v. i.

Mgr. Jiří Plocek, PhD, ÚACH AV ČR, v. v. i.

prof. RNDr. Jiří Pinkas, PhD, Masarykova universita, PŘF, Brno

Ing. Oldřich Schneeweiss, DrSc., Ústav fyziky materiálů AV ČR, v.v.i.

Ing. Jan Šubrt, CSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

Dozorčí rada jmenována dne 1. května 2012 ve složení:

předseda: Ing. Karel Aim, CSc., ÚCHP AV ČR, v. v. i.

místopředseda: doc. Ing. Zbyněk Plzák, CSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc., ÚCHP AV ČR, v. v. i.

prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc., FChT VŠCHT Praha

prof. Ing. Petr Mikulášek, CSc., FChT Univerzita Pardubice

**b) Změny ve složení orgánů:** v r. 2014 nebyly provedeny žádné změny

### **c) Informace o činnosti orgánů:**

Ředitelka:

V r. 2014 byly zajišťovány především následující agendy:

- plnění výzkumných úkolů a postupu řešení grantových projektů včetně prezenčních kontrol aktivit a personálního zabezpečení v jednotlivých odděleních a laboratořích
- řádné vedení účetnictví
- výběrová přijímací řízení vysokoškolsky vzdělaných pracovníků
- periodická činnost a kontrola na úseku bezpečnosti práce, prevence rizik a ochrany zdraví při práci.

Ředitelka se účastnila všech zasedání Rady ústavu a zasedání Dozorčí rady.

V průběhu r. 2014 byly vydány Interní předpisy (IP) č. 86, stanovující výměru a podmínky čerpání dovolené, č. 87, k využití nákladných přístrojů v rámci jiné činnosti a č. 88, týkající se poradních orgánů ředitelky. Byly vydány 3 příkazy ředitelky k uchování dokumentace k užívání přístrojů a bezpečnostních listů chemikálií užívaných na pracovištích ÚACH AV ČR, v. v. i., k vyhlášení celoustavní dovolené na 29. - 31. 12. 2014 a k provedení inventarizace hospodářských prostředků v r. 2014. Dále byly vydány 4 směrnice pro využití prostředků Sociálního fondu v r. 2014, pro výpočet doplňkových nákladů na projekty výzkumu a vývoje v r. 2014, pro použití a účtování finančních prostředků na projekty VaVal a pro organizační zabezpečení, použití a účtování finančních prostředků na řešení projektů v programech na podporu aplikovaného výzkumu, experimentálního vývoje a inovací Technologické agentury ČR.

V závěru roku byla vyhodnocena a individuálně oceněna publikační aktivita pracovníků. Byla rovněž provedena analýza věkové struktury pracovníků ústavu, posouzeno personální zabezpečení řešení jednotlivých výzkumných úkolů a přijata příslušná opatření pro r. 2015.

Přístrojové vybavení ústavu bylo v r. 2014 doplněno o příruční spektrometr NITON pro Laboratoř environmentální geochemické analýzy a sušičku rozpouštědel pro Oddělení materiálové chemie a Oddělení syntéz. Ústav uspěl s návrhem na pořízení NMR spektrometru v konkurzu zřizovatele na nákup nákladných přístrojů. Předpokládáme, že po splnění zákonných povinností bude přístroj v ceně cca 20 mil. Kč s 20% spoluúčástí ústavu pořízen v r. 2015.

V součinnosti s Technickou komisí a s přihlédnutím k požadavkům jednotlivých oddělení a laboratoří byl vypracován plán nákladných oprav a akvizicí přístrojového vybavení pro další období.

V r. 2014 bylo řešeno 24 projektů VaV v programech GA ČR (15), MPO (1), TA ČR (4), MŠMT/OPVK (1), MŠMT/OPVaVpl (1), 7RP EU (2) a SPS NATO (1). Účelové prostředky plynoucí z podpory zmíněných poskytovatelů do rozpočtu představovaly cca 48 % neinvestičních nákladů ústavu. Mzdové prostředky vyplacené z účelových dotací činily cca 35%.

V r. 2014 byl udělen 1 patent a uzavřena 1 licenční smlouva.

#### Rada pracoviště:

V r. 2014 se uskutečnilo 5 jednání Rady ÚACH AV ČR v. v. i.:

##### 53. jednání, 4.3 – 6. 3. 2014 *per rollam*

- Rada projednala a odsouhlasila návrh ing. Tomáše Těthala, CSc., zástupce průmyslu, jako kandidáta na členství v Akademickém sněmu AV ČR pro období 2014-2018.

##### 54. jednání, 2. dubna 2014

- Rada projednala přihlášky do veřejných soutěží GAČR pro rok 2015. Rada všechny návrhy doporučuje k podání.
- Předseda Rady informoval členy o připravované Strategii AV ČR a o postupu při vytváření nosného hesla, které by charakterizovalo vztah Strategie směrem k veřejnosti. Ředitelka Ústavu představila návrh zapojení Ústavu do jednotlivých programů a podprogramů Strategie.

##### 55. jednání, 27. května 2014

- Rada projednala a schválila Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ústavu za r. 2013
- Rada se seznámila se zprávou auditora o ověření účetní závěrky za r. 2013
- Rada projednala a schválila rozpočet ústavu na r. 2014
- Rada schválila přesun hospodářského výsledku za r. 2013 do Rezervního fondu
- Rada projednala a schválila návrh na změnu zřizovací listiny ústavu spočívající doplnění předmětu jiné činnosti ústavu, které reflektuje rozšíření předmětu podnikání v Živnostenském rejstříku o obor *Výroba chemických látek*.

##### 56. jednání, 17. října 2014

- Rada vyslechla informace z porady ředitelů a předsedů rad pracovišť, týkající se Strategie, nadcházejícího hodnocení pracovišť, nového loga AVCR a popularizačních aktivit.
- V přítomnosti navrhovatele Rada projednala návrh J. Macháčka na změnu IP č. 86, týkající se plánu dovolených. Rada tento návrh neschválila.
- Rada projednala návrh S. Švarcové na změnu článku 2 IP č. 69, Volebního řádu RÚ. Rada tento návrh neschválila.

##### 57. jednání, 22. 12. - 5. 1. 2015, *per rollam*

- Rada projednala a vyslovila souhlas s doplněním Fondu reprodukce majetku o 25 tis. Kč z Rezervního fondu.

#### Dozorčí rada:

V r. 2014 se uskutečnilo 1 jednání Dozorčí rady ÚACH AV ČR v.v.i..

##### 12. zasedání, 20. května 2014

Dozorčí rada na tomto jednání

- vyslovila souhlas s Výroční zprávou o činnosti a hospodaření ÚACH AV ČR, v. v. i.

v r. 2013.

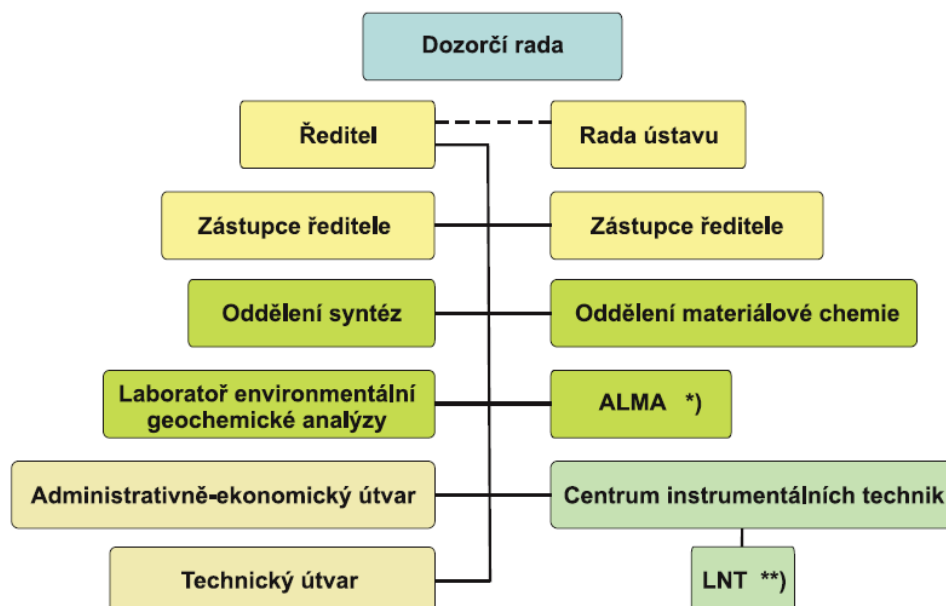
- vzala na vědomí zprávu auditora o ověření účetní závěrky za r. 2013.
- vyslovila souhlas s návrhem rozpočtu nákladů a výnosů na rok 2014.
- určila auditorem na rok 2014 firmu DILIGENS pod vedením Ing. Pavly Císařové, CSc..
- vyslovila souhlas se změnou zřizovací listiny ÚACH v odstavci upravujícím předmět jiné činnosti.
- projednala žádost ústavu o jmenovitou institucionální investiční dotaci na nákup NMR spektrometru a vydala předchozí písemný souhlas k této žádosti.
- zhodnotila manažerské schopnosti ředitelky.

## II. Informace o změnách zřizovací listiny:

V r. 2014 došlo ke změně zřizovací listiny, spočívající v doplnění předmětu jiné činnosti ústavu, které reflektuje rozšíření předmětu podnikání v Živnostenském rejstříku o obor *Výroba chemických látek*.

### Organizační změna:

1. ledna 2014 vešla v platnost změna organizačního schématu ústavu zohledňující aktuální stav výzkumného zaměření. Ústav nyní sestává ze čtyř vědeckých jednotek – Oddělení syntéz, Oddělení materiálové chemie, Laboratoře environmentální geochemické analýzy a Akademické laboratoře materiálového průzkumu malířských děl a vědecko-servisního útvaru, Centra instrumentálních technik. Administrativně-ekonomický a Technický útvar zajišťují infrastrukturu.



\*) Akademická laboratoř materiálového průzkumu malířských děl (ALMA),  
společné pracoviště Akademie výtvarných umění v Praze a Ústavu anorganické chemie AV ČR, v.v.i.

\*\*\*) Laboratoř nízkých teplot  
společné pracoviště FzÚ AVČR, v.v.i., ÚACH AVČR, v.v.i., PFF a MFF UK v Praze

### III. Hodnocení hlavní činnosti:

#### 1. Vědecká činnost ústavu a uplatnění jejích výsledků

##### 1a) Stručná charakteristika vědecké činnosti

Nové materiály a jejich aplikace

- nanostrukturní a nanokompozitní materiály na bázi grafenu, oxidů a chalkogenidů kovů; aplikace v oblasti environmentální fotokatalýzy a při degradaci bojových chemických látek, pesticidů a cytostatik
- nanoporézní, vrstevnaté a polymerní materiály s baktericidními, luminiscenčními a fotokatalytickými vlastnostmi
- nanokompozity feromagnetik a termoelektrik a multifunkční magnetické nanokompozity s katalytickými vlastnostmi
- materiály na bázi hlinitokřemičitanových matic pro kvalifikované aplikace

Nové sloučeniny a jejich vlastnosti:

- cílený vývoj reaktivních strukturních boranových bloků
- biologicky aktivní boranové klastry s využitím jako virostatika nebo cytostatika
- heteroborany, karborany, jejich deriváty a komplexy s přechodnými kovy
- vývoj nové generace činidel pro selektivní extrakce radionuklidů z jaderných odpadů
- modifikace a ochrana povrchů kovů za použití derivátů boranů a karboranů
- anorganické klastry na bázi molybdenu a boranové klastry pro luminiscenční materiály

Metody a speciální techniky

- pokročilé charakterizace materiálů (elektronová mikroskopie, mikroskopie atomárních sil, rtg difrakce, termická analýza, chemická speciace, infračervená, Mössbauerova a Ramanova spektroskopie)
- analýza sedimentů pro paleoenvironmentální rekonstrukce
- materiálový výzkum malířských děl

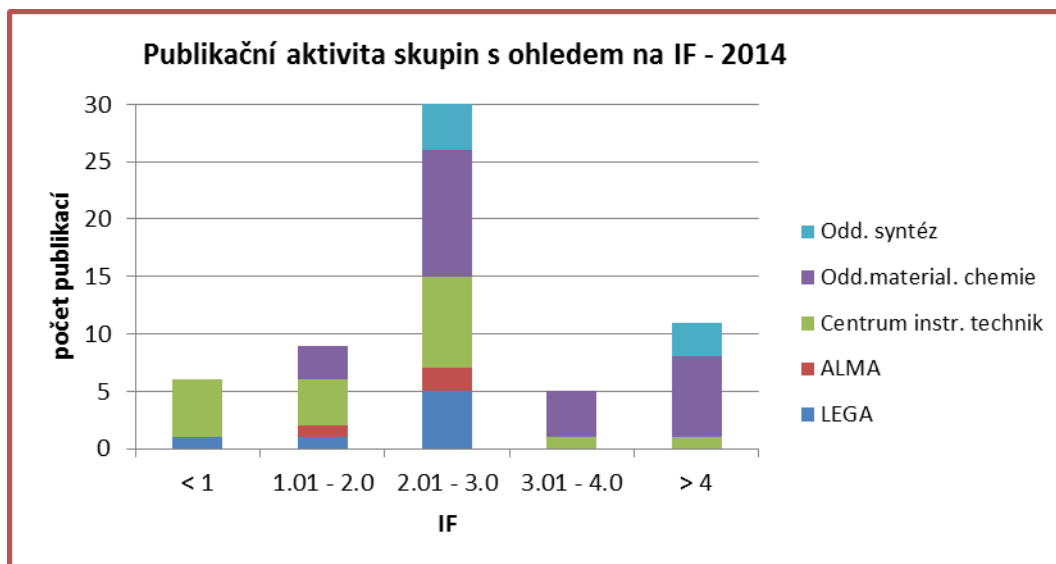
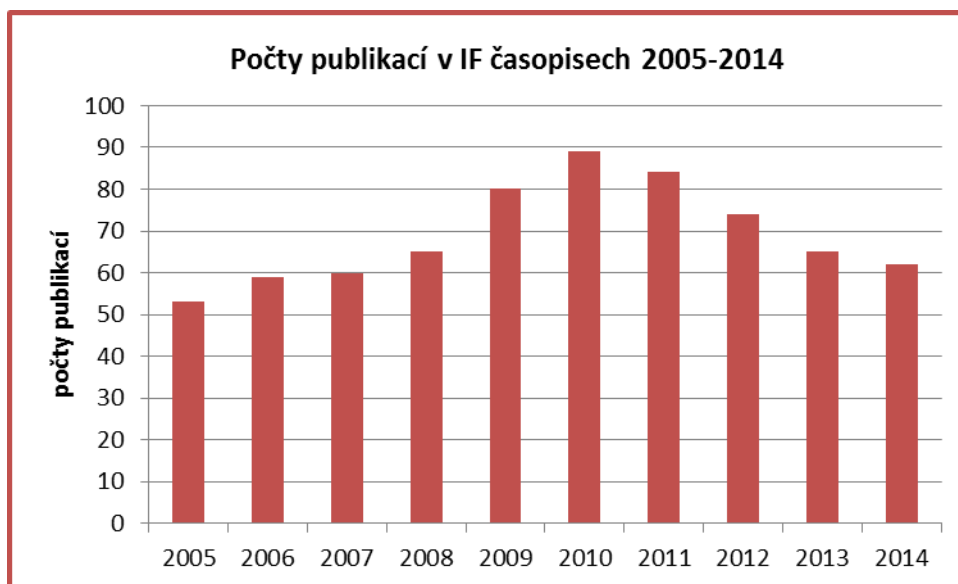
##### 1b) Výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti a jejich aplikací

Nejvýznamnější výsledky byly v r. 2014 získány především v oblastech:

- materiálové chemie se zaměřením na grafen a grafenoxid, fotofunkční hybridní materiály obsahující porfyrinové senzitivátory, materiály s baktericidními a virocidními vlastnostmi obsahující nanočástice ušlechtilých kovů stabilizované na přírodních substrátech, nanostrukturní oxidy a sulfidy kovů pro fotokatalýzu a destrukci bojových látek, mikročástice ušlechtilých kovů a oxidů kovů s definovanou morfologií, materiály s multiferoickým chováním a termoelektrické materiály.

- chemie nových karboranů, heteroboranů a jejich komplexů s přechodnými kovy: byla provedena syntéza biologicky aktivních karboranových klastrů s využitím jako virostatika, popsána interakce boranových klastrů se světlem a s povrchy kovových filmů a koloidů a vyvinuty syntetické metody pro cílený vývoj reaktivních strukturních boranových bloků.

Poznatky byly zveřejněny v 62 pracích v mezinárodních časopisech, z toho většina prací v časopisech, jejichž impaktní faktor (IF) výrazně převyšuje medián v oboru. Na následujících obrázcích je znázorněn vývoj publikační aktivity pracovníků ústavu v období 2005 – 2014 (zdroj Web of Knowledge) a struktura publikačního výstupu v r. 2014 v jednotlivých odděleních ústavu s ohledem na impakt faktor (IF) časopisů.



Přestože produkce v posledních 3 letech mírně klesla úměrně sníženému počtu pracovníků, kvalita prací stoupá. Více než ¾ prací bylo zveřejněno v časopisech s IF>2; v předchozích letech to byla více než polovina prací.

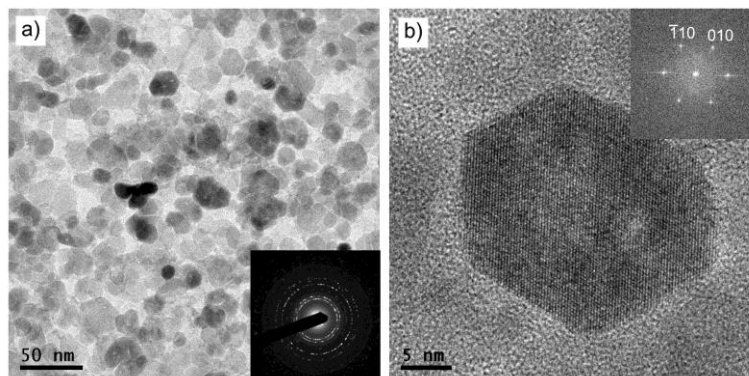
Výsledky byly prezentovány také v 70 příspěvcích na mezinárodních konferencích.



## Významné výsledky s uvedením citací:

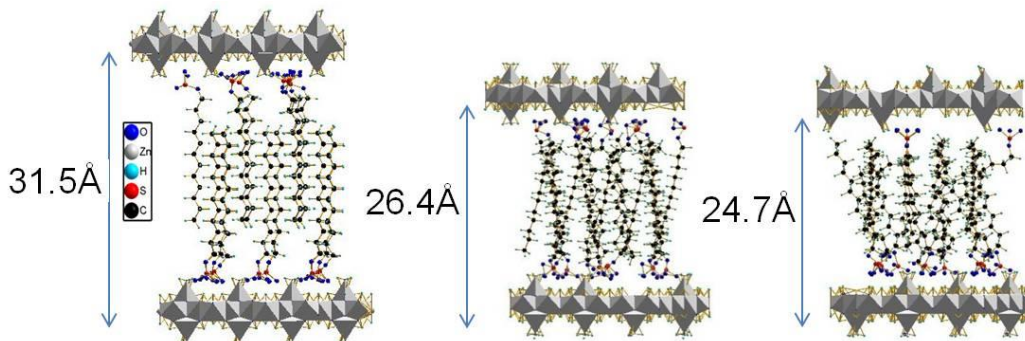
### (1) Nanodestičky oxidu zinečnatého pro nové technologie čištění vzduchu a vody

Novou metodou jsme připravili nanodestičky ZnO o tloušťce 0,6 nm, které lze uspořádat ve formě transparentních filmů nanometrových tlouštěk [1,2]. Prokázali jsme, že tyto filmy fotokatalyzují rozklad organických polutantů vlivem UV záření mnohem efektivněji než nanočástice ZnO, které se připravují běžnými metodami. Nanodestičky ZnO jsou vhodné pro vývoj baktericidních povrchů a nových technologií pro čištění vzduchu a vody.



#### Nanodestičky oxidu zinečnatého použité pro přípravu transparentních nanovrstev

Nanodestičky mají pravidelný hexagonální tvar. Byly měřeny při dvou zvětšeních pomocí transmisního elektronového mikroskopu.



#### Struktura vrstevnatého hydroxidu zinečnatého

Tento materiál se používá k přípravě nanodestiček ZnO. Vzdálenost mezi hydroxidovými vrstvami je 31,5, 26,4 nebo 24,7 Å a prostor mezi nimi je vyplněn molekulami dodecylsulfátu. Jak plyne z experimentů a výsledků molekulárních simulací, jsou uhlíkové řetězce dodecylsulfátu uspořádány pravidelně (vlevo, uprostřed) nebo vyplňují prostor neuspořádaně (vpravo).

Hynek, J.; Kalousek, V.; Žouželka, R.; Bezdička, P.; Dzik, P.; Rathouský, J.; Demel, J.; Lang, K.: High Photocatalytic Activity of Transparent Films Composed of ZnO Nanosheets. *Langmuir* 30 (2014), s. 380-386; IF 4.384..

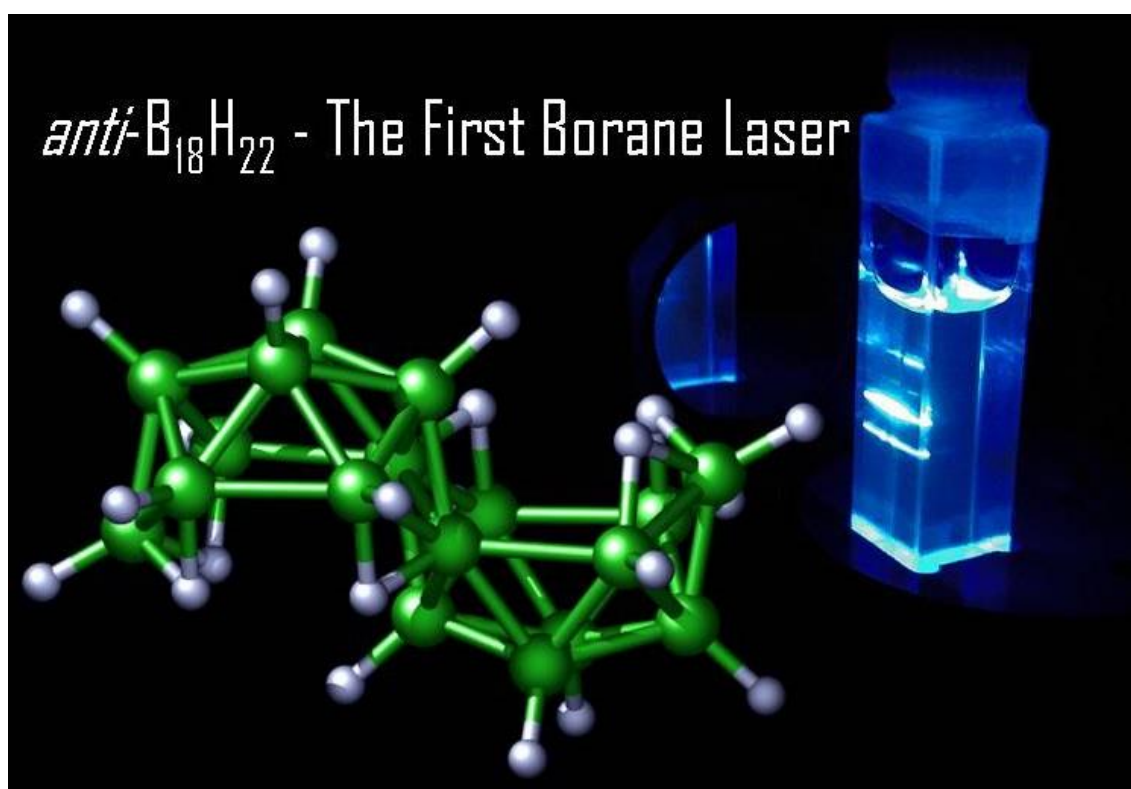
Demel, J.; Hynek, J.; Kovář, P.; Dai, Y.; Taviot-Guého, Ch.; Demel, O.; Pospíšil, M.; Lang, K.: Insight into the Structure of Layered Zinc Hydroxide Salts Intercalated with Dodecyl Sulfate Anions. *Journal of Physical Chemistry C*, Roč.118 (2014), s. 27131-27141; IF 4.835.

Spolupráce: ÚFCH J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., MFF UK v Praze, FCHT TU Brno, Clermont Université, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, Francie.



## (2) První boranový laser

Emise světla z elektronicky excitovaných stavů tvoří fyzikálně-chemický základ světelných zdrojů využitelných v laserových technologiích. Ve své studii jsme předvedli zcela novou alternativu k existujícím materiálům pro lasery. Bylo prokázáno, že boran *anti*-B<sub>18</sub>H<sub>22</sub> vykazuje modrou laserovou emisi s dobrou účinností a fotostabilitou, která překonává řadu komerčně využívaných laserových barviv. Zveřejněné pozorování otevírá cesty k využití dosud neuvažovaných zdrojů-boranů v laserové technologii.



***Anti*-B<sub>18</sub>H<sub>22</sub> – první boranový laser**

Na obrázku je roztok *anti*-B<sub>18</sub>H<sub>22</sub>, ve kterém právě dochází k laserové emisi spolu s molekulární strukturou emitující sloučeniny, která byla určena na základě rentgenové difrakční analýzy na monokrystalu látky.

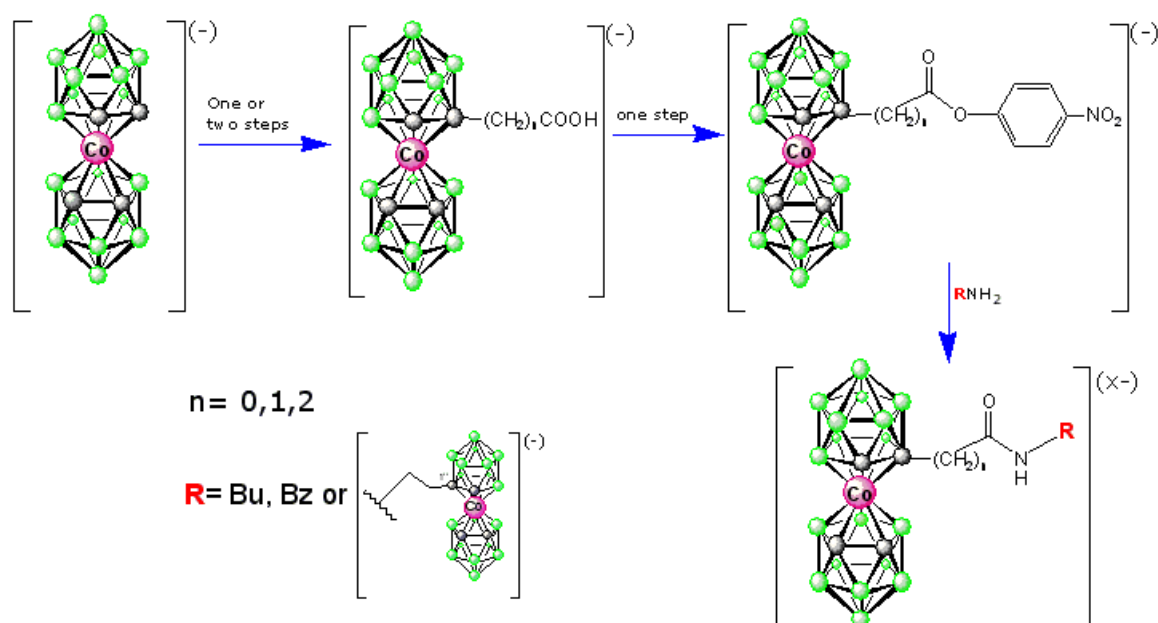
Londesborough, M. G. S.; Hnyk, D.; Bould, J.; Serrano-Andres, L.; Sauri, V.; Oliva, J. M.; Kubat, P.; Polivka, T.; Lang, K.: Distinct photophysics of the isomers of B<sub>18</sub>H<sub>22</sub> explained. *Inorganic Chemistry*, Roč. 51 (2012), s. 1471-1479; IF 4.601.

Cerdán, L.; Braborec, J.; Garcia-Moreno, I.; Costela, A.; Londesborough, M. G.S.: A borane laser. *Nature Communications*, Roč. 6 (2015), Art. No. 5958; IF 10.742.

Spolupráce: Instituto de Química-Física "Rocasolano", Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Madrid, Spain; Přírodovědecká fakulta Univerzity Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem.

### (3) Syntéza strukturních metallakarboranových bloků nesoucích karboxylovou skupinu

Byla nalezena nová cesta k přímé substituci metallakarboranového aniontu reaktivními skupinami, které umožňují snadnou inkorporaci do biologicky aktivních látek a materiálů. Cílené zavedení kobalt bis(dikarbollidového) iontu do funkčních boranových molekul dosud naráželo na úskalí dané omezenou dostupností metod přímé derivatizace. Výsledek představuje spolehlivý postup přímé substituce atomů uhlíku či boru karboxylovými a reaktivními esterovými skupinami. Využití je demonstrováno snadnou tvorbou amidických vazeb a propojením klastrů do struktur inhibitorů enzymu HIV Proteasa.



#### Schématické znázornění C-substituce na kobalt bis(dikarbollidovém) aniontu

Obrázek ilustruje chemickou strukturu kobalt bis(dikarbollidového)(1-) aniontu a studované chemické transformace na jeho skeletu za vzniku karboxylových derivátů a amidů. Látky, které obsahují dva klastry propojené amidickou vazbou reprezentují schematicky znázorněnou strukturu aktivních inhibitorů enzymu HIV-PR.

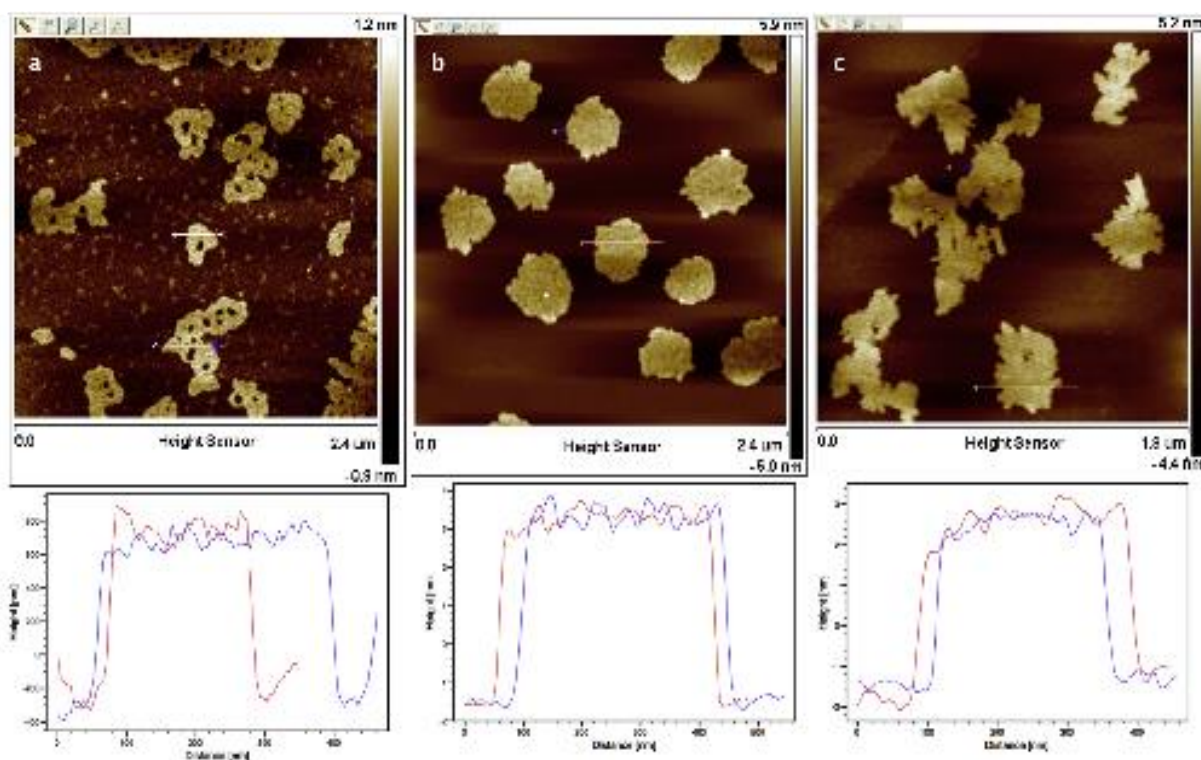
Nekvinda, J.; Šícha, V.; Hnyk, D.; Grúner, B.: Synthesis, characterization and some chemistry of C- and B-substituted carboxylic acids of cobalt bis(dicarbollide). Dalton Trans., Roč. 43 (2014), s.5106-5120; IF 4.097.

Grúner, B.; Šícha, V.; Hnyk, D.; Londesborough, M. G. S., Císařová, I.: The synthesis and structural characterization of polycyclic derivatives of cobalt bis(carbollide)(1-). Inorganic Chemistry, Roč. 54 (2015). S. 3148-3158; IF 4.794.

Spolupráce: PŘF Univerzity Karlovy v Praze.

#### (4) Nová metoda přípravy grafenu pro hydrofilní aplikace

V Oddělení materiálové chemie byla vyvinuta nová, jednoduchá, rychlá a ekologická metoda přípravy grafenu exfoliací grafitu v alkalickém prostředí. Metoda přípravy je založena na interkalaci manganu alkalického kovu, který vzniká reakcí manganistanu s alkalickým hydroxidem působením intenzivního ultrazvukového vlnění. Tato neoxidační metoda umožňuje připravit vysoce čistý grafen s minimálním obsahem funkčních skupin a povrchových defektů. Připravený grafen byl charakterizován pomocí rentgenové difrakce a mikroskopických technik včetně transmisní elektronové mikroskopie a mikroskopie atomárních sil. Použití pouze alkalického prostředí pro přímou přípravu grafenu z grafitu nebylo doposud popsáno ani aplikováno. Bylo zjištěno, že takový způsob přípravy vede k překvapivě vysokým výtěžkům grafenu a poskytuje stabilní produkt pro hydrofilní aplikace.



**AFM snímek exfoliovaného grafenu za použití roztoků:  
a)  $\text{KMnO}_4$  a  $\text{KOH}$ , b)  $\text{NaMnO}_4$  a  $\text{NaOH}$  a c)  $\text{LiMnO}_4$  a  $\text{LiOH}$**

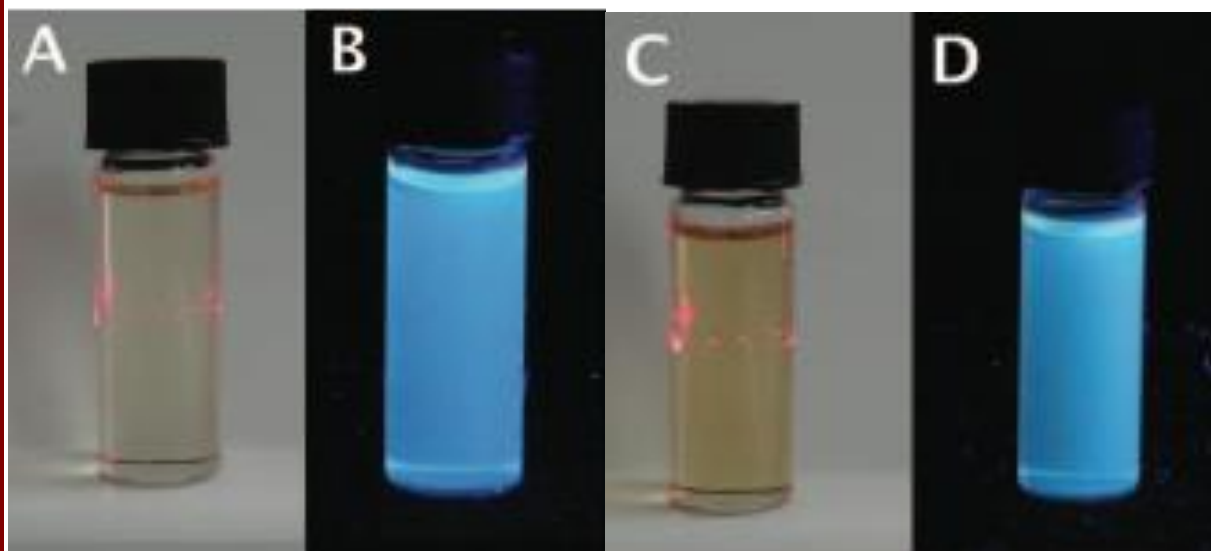
Na obrázku pořízeném pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM) je znázorněna topografie jednotlivých grafenových lístků syntetizovaných za použití různých alkalických roztoků

Štengl, V.; Henych, J.; Bludská, J.; Ecorchard, P.; Kormunda, M.: A green method of graphene preparation in an alkaline environment. *Ultrasonics Sonochemistry*, Roč. 24 (2015), s. 65-71; IF 3.816.

Spolupráce: Přírodovědecká fakulta Univerzity Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem.

## (5) BN a BCN kvantové tečky připravené pomocí výkonového ultrazvuku

Jednovrstvé destičky h-BN a h-BCN, svou strukturou analogické grafenu, byly připraveny působením výkonového ultrazvuku v tlakovém reaktoru. Exfoliace vrstevnatých materiálů pomocí ultrazvuku je atraktivní cesta přípravy jednovrstvých krystalů. Produkty byly podrobeny analýze kvality exfoliace a strukturálních vlastností pomocí rentgenové difrakce a mikroskopických technik včetně transmisní elektronové mikroskopie a mikroskopie atomárních sil (AFM). Takto připravené jednovrstvé nano-destičky byly použity jako prekurzory pro syntézu UV luminiscenčních kvantových teček BN a BCN (BNQDTs a BCNQDTs) metodou top-down. Delaminované destičky BN a BCN byly zahřívány v ethylen glykolu na teplotu varu, dále rozlamovány varem rozpouštědla a solvatovány molekulami etylenglykolu za vzniku kvantových teček. Vlastnosti těchto částic byly popsány s využitím fotoluminiscenční spektrometrie.



Fotografie BNQDTs na a) denním světle, b) UV světle  
a BCNQDTs na c) denním světle, d) UV světle

Na obrázku jsou kvantové tečky osvětlené denním a UV světlem, ve kterém je zřejmá silná světelná emise

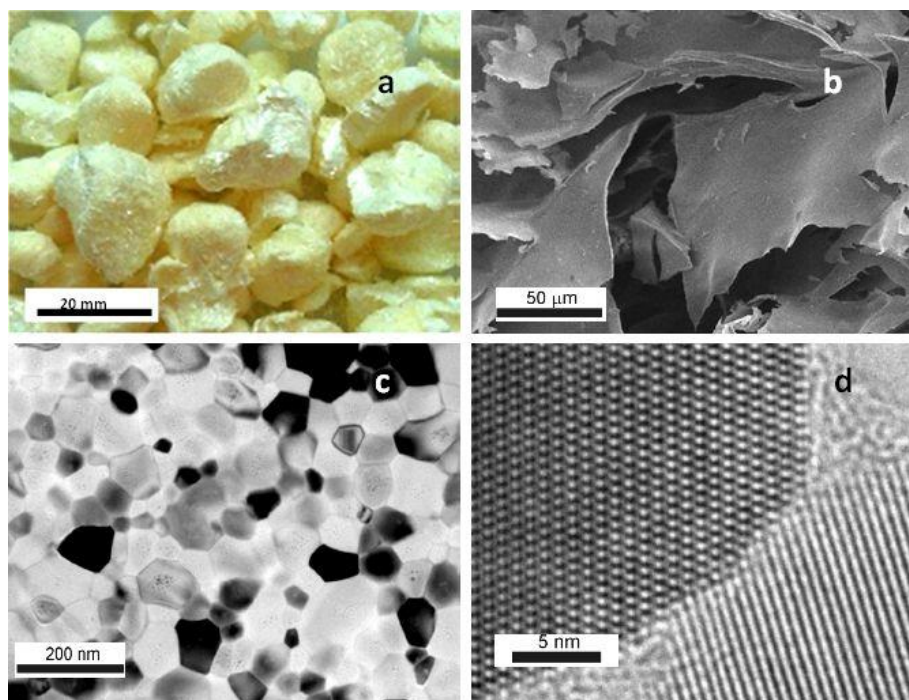
Štengl, V.; Henych, J.; Kormunda, M.: Self-Assembled BN and BCN Quantum Dots Obtained from High Intensity Ultrasound Exfoliated Nanosheets. *Science of Advanced Materials*, Roč. 6 (2014), s.1106-1116; IF 2.908

Spolupráce: Přírodovědecká fakulta Univerzity Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem.



## (6) Fotoaktivní anatasová pěna

Lyofilizace žlutých vodných koloidů peroxo-polytitanické kyseliny vede k pěně složené z tenkých lístečků, které zahříváním poskytují rovinné agregáty nanokrystalů anatasu. Materiál žíhaný nad 500 °C je díky perfektní krystalinitě a plošnému tvaru agregátů nanokrystalků vysoce fotoaktivní. Lze jej využít pro fotoaktivních nátěry, při čištění vody a vzduchu a jako účinný filtr UV záření. Syntetickou metodu lze použít i pro přípravu dopovaných fotokatalyzátorů s modifikovanou světelnou citlivostí.



### Morfologie a struktura anatasové pěny

a: lyofilizovaná peroxopolytitanická kyselina – snímek zobrazuje nativní formu preparátu; b: lyofilizovaná peroxopolytitanická kyselina - snímek ze skenovacího elektronového mikroskopu dokládá lístečkovou morfologii lyofilizovaného materiálu; c: lyofilizovaná peroxopolytitanická kyselina žíhaná na 850 °C - snímek z transmisního elektronového mikroskopu ukazuje planární agregáty nanokrystalků anatasu; d: lyofilizovaná peroxopolytitanická kyselina žíhaná na 850 °C - snímek z transmisního elektronového mikroskopu s vysokým rozlišením dokládá perfektní krystalinitu jednotlivých částic anatasu.

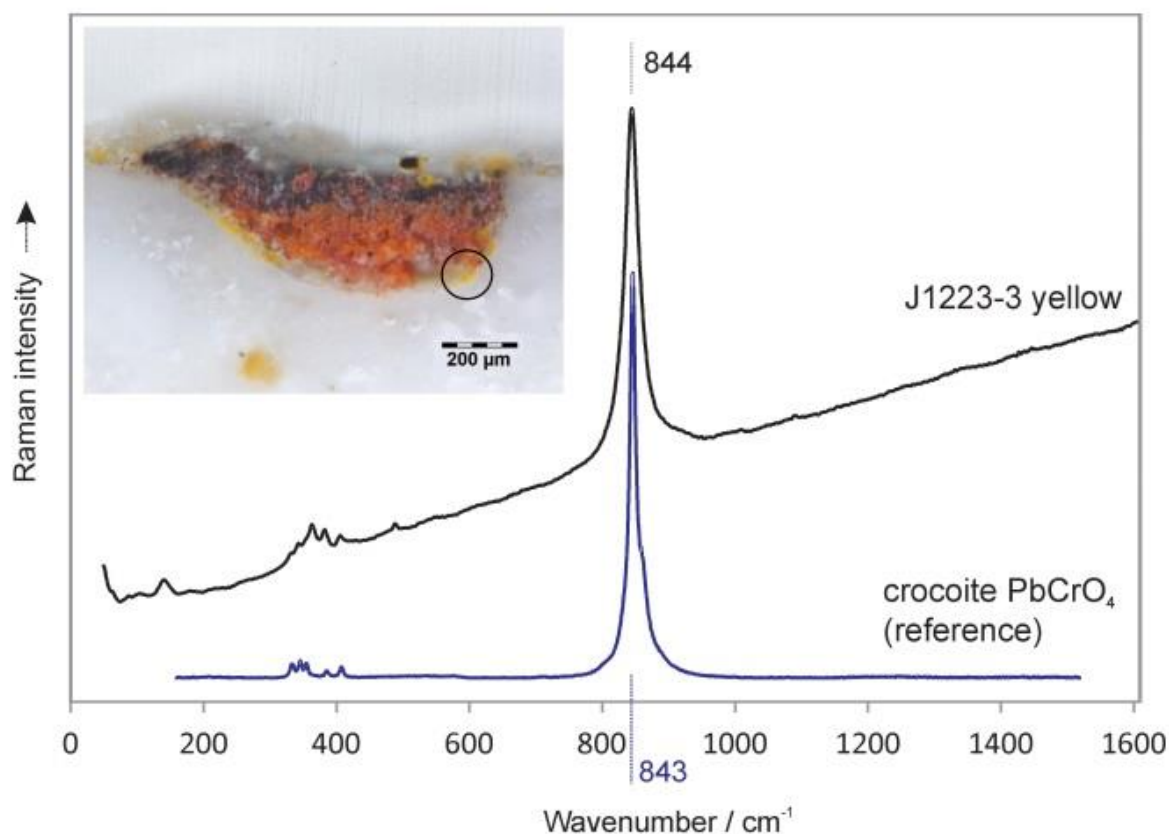
Šubrt, J.; Pulišová, P.; Boháček, J.; Bezdička, P.; Pližingrová, E.; Volfová, L.; Kupčík, J.: Highly photoactive 2D titanium dioxide nanostructures prepared from lyophilized aqueous colloids of peroxo-polytitanic acid. *Materials Research Bulletin*. Roč. 48 (2014), s. 405-412; IF 1.974.

Pližingrová, E.; Volfová, L.; Svora, P.; Labhsetwar, Nitin K.; Klementová, M.; Szatmáry, L.; Šubrt, J.: Highly photoactive anatase foams prepared from lyophilized aqueous colloids of peroxo-polytitanic acid. *Catalysis Today*, Roč. 240 (2015), s. 107-113; IF 3.312.

Spolupráce: National Environmental Engineering Research Institute (NEERI-CSIR), Environmental Materials Division, Nehru Marg, Indie.

## (7) Vzácny minerální pigment dosvědčuje unikátnost maleb

V silně poškozených a jen torzálně zachovaných nástěnných malbách v kostele v Kuřívodech (bývalý vojenský prostor Ralsko) jsme pomocí Ramanovy mikrospektroskopie a rtg. mikrodifrakce identifikovali přírodní minerál krokoit ( $\text{PbCrO}_4$ ), použitý záměrně jako žlutý pigment, a také dosud prakticky neznámý mimetit ( $\text{Pb}_5(\text{AsO}_4)_3\text{Cl}$ ), který původní není a vzniká jako degradační produkt. V případě krokoitu jde teprve o druhé prokázané použití tohoto přírodního pigmentu v evropském malířství dokládající nejen vysoké stáří maleb (kolem r. 1300), ale také transfer materiálů a technologií z oblasti středomoří, kde byl krokoit ve starověku používán. Do středověké Evropy pronikl zřejmě jen omezeně a později už se v malbách nevyskytuje až do výroby jeho syntetického analogu v 19. století.



Na obrázku je příčný mikrořez vzorkem nástěnné malby v bílém světle a Ramanovo spektrum z místa žluté barvy označeného kroužkem (J1223-3 yellow) spolu s referenčním spektrem krokoitu (reference).

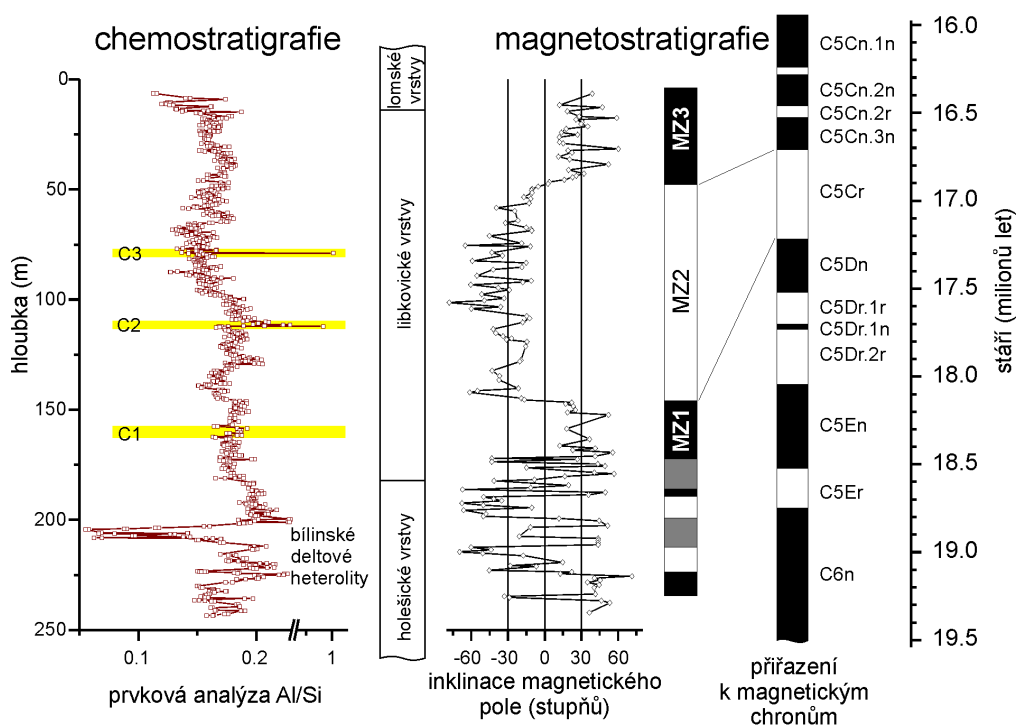
Hradil, D.; Hradilová, J.; Bezdička, P.; Švarcová, S.; Čermáková, Z.; Košařová, V.; Němec, I.: Crocoite  $\text{PbCrO}_4$  and mimetite  $\text{Pb}_5(\text{AsO}_4)_3\text{Cl}$ : rare minerals in highly degraded Mediaeval murals in Northern Bohemia. *Journal of Raman Spectroscopy*, Roč. 45 (2014), s. 848-858; IF 2.519

Spolupráce: Akademie výtvarných umění v Praze, Přírodovědecká fakulta UK v Praze.

## (8) Využití sedimentů mosteckého souvrství jako archívu prostředí spodního miocénu

Pomocí chemostratigrafie, magnetostratigrafie a cyklostratigrafie byly popsány a datovány jezerní sedimenty mosteckého souvrství (stáří spodní miocén, 17,4-16,6 miliónů let). Jedná se o největší asi 1 milión let trvající sladkovodní jezero v Evropě ve spodním miocénu. Jeho sedimentární záznam má rozlišení asi 1-2 tisíce let, takže jde pro danou dobu o světový unikát. Bylo zjištěno, že předchozí datování sedimentů bylo nesprávné, sedimenty odrážejí orbitální řízení klimatu těsně před začátkem a na samém začátku miocenního klimatického optima a sledované období nepřineslo žádné dramatické skokové klimatické výkyvy. Vytvořený stratigrafický rámec umožňuje integrovat popis vývoje sedimentárního prostředí a makroflóry ve spodnomiocenních pánvích v severozápadních Čechách a středním Sasku.

### Datování sedimentů mosteckého souvrství



Matys Grygar, T.; Mach, K.; Schnabl, P.; Pruner, P.; Laurin, J.; Martinez, M.: A lacustrine record of the early stage of the Miocene Climatic Optimum in Central Europe from the Most Basin, Ohře (Eger) Graben, Czech Republic. Geological Magazine, roč. 151, č. 6, s. 1013-1033; IF 2,177.

Mach, K.; Teodoridis, V.; Grygar, T.M.; Kvaček, Z.; Suhr, P.; Standke, G.: An evaluation of palaeogeography and palaeoecology in the Most Basin (Czech Republic) and Saxony (Germany) from the late Oligocene to the Early Miocene. Neues Jahrbuch für Geologie und Paläontologie – Abhandlungen, roč. 272, č. 1, s. 13-45; IF 0,541.

Spolupráce: Severočeské doly, a.s.; Université de Bourgogne, Dijon, Francie; Geologický ústav AV ČR



## **2. Pedagogická spolupráce s vysokými školami**

Spolupráce s vysokými školami probíhá při uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů

Bakalářské a magisterské studijní programy:

Pracovníci ústavu se v r. 2013 podíleli na zajištění přednášek, seminářů a vedení prací v bakalářském programu Anorganická chemie (PřF UK v Praze) a v magisterských programech Anorganická chemie, Analytická chemie a Geologie (PřF UK v Praze), Ekologie a ochrana prostředí (FŽP UJEP Ústí nad Labem), Chemie (PřF UJEP Ústí nad Labem) a Aplikace přírodních věd (Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Gépészmérnöki Kar Zalaegerszeg). Působí rovněž ve zkušebních komisích.

V průběhu letního semestru 2013/2014 a zimního semestru 2014/2015 přednášeli pracovníci ústavu v uvedených programech 80 hodin.

Doktorské studijní programy:

V rámci společných akreditací s:

VŠCHT v DSP Chemie, Chemie a chemické technologie, Chemie a technologie materiálů, Analytická a fyzikální chemie,

PřF UK v DSP Anorganická chemie, Analytická chemie a Fyzikální chemie,

Univerzitou Pardubice v DSP Anorganická chemie, Chemie a chemické technologie a Chemie a technologie materiálů

a FŽP Univerzity J. E. Purkyně v Ústí nad Labem v DSP Ekologie a ochrana prostředí

se pracovníci ústavu podíleli na výuce a vedení doktorských prací a působili v oborových radách a zkušebních komisích těchto DSP. Mimo uvedené akreditace se pracovníci ústavu podílejí na výuce a vedení prací v DSP Geologie (PřF UK) a Aplikace přírodních věd (Budapesti Műszaki és). Během letního semestru 2013/2014 a zimního semestru 2014/2015 pracovníci ústavu v uvedených programech DSP odpřednášeli přes 60 hodin.

V r. 2014 pracovalo pod supervizí ústavních školitelů 19 studentů DSP. Na řešení výzkumných projektů se účastnilo 20 pregraduálních studentů, z nichž 10 pracovalo na diplomových nebo bakalářských pracích.

Společně s FŽP Univerzity J. E. Purkyně v Ústí nad Labem se pracovníci ústavu účastnili projektu OPVK Modernizace výuky technických a přírodovědných oborů na UJEP se zaměřením na problematiku ochrany životního prostředí.

## **3. Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou**

### **3a) Společné projekty VaV podporované z veřejných prostředků**

3a-1) Nové perspektivní nanokompozitní materiály na bázi chalkogenidů přechodných kovů pro fotovoltaické nátěrové hmoty

Partneři: Rokospol, a.s., Nanogies s.r.o.

Poskytovatel: MPO (projekt FR-TI4/399)

Dosažený výsledek: Byla vyvinuta metoda přípravy fotovoltaických materiálů na bázi sulfidů Cu, Zn, Ag a In vhodná pro průmyslové využití.

3a-2) Progresivní technologie výroby multifunkčních nanočástic ZnO

Partner: Synpo, a.s.

Poskytovatel: TA ČR (projekt TA0210541)

Dosažený výsledek: Byla vypracována metoda přípravy fotokatalyticky aktivního destičkového ZnO dopovaného vizmutem pro nátěrové aplikace.

3a-3) Vývoj multifunkčního fotoaktivního nanokompozitu pro využití ve stavebnictví a nátěrových hmotách

Partneři: DENAS COLOR a.s., ÚFCH J.H. AV ČR, v.v.i., BARVY A LAKY TELURIA, s. Technická univerzita v Liberci

Poskytovatel: TA ČR (projekt TA03010994)

Dosažený výsledek: Hlavním výsledkem dosavadních prací je vývoj a optimalizace složení vysoce fotoaktivní transparentní nátěrové hmoty na bázi  $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$  ve vodném médiu. Nátěr je použitelný na ošetření povrchů jak na anorganické, tak i organické bázi a v krátkodobých (několikaměsíčních) aplikačních testech prokázal vynikající samočistící vlastnosti bez známek zjevné fotokatalytické degradace podkladu.

3a-4) Využití fotoaktivních nanopovrchů k řešení aktuálních problémů čištění vzduchu a vody

Partneři: Technická univerzita v Liberci, A T G s.r.o., Isolit-Bravo, spol. s r.o., Retap, spol. s r.o., ÚFCH J. H. AV ČR, v.v.i.

Poskytovatel: TA ČR (projekt TA03020948)

Dosažený výsledek: V průběhu dosavadního řešení se podařilo zkonstruovat přímotopný panel, který současně funguje jako fotokatalytická čistička vzduchu a stanovit účinnost zařízení jak v laboratorních, tak i reálných podmínkách při čištění vzduchu v místnostech. Dalším cílem projektu je vypracovat postup čištění oplachových defektoskopických vod, které obsahují komplex barviv, povrchově aktivních činidel a stabilních pomocných látek; zde se prozatím podařilo prokázat, že aplikací fotokatalýzy je možné vyčistit tyto odpady až na úroveň čistoty destilované vody. Proces je však pomalý a pro praktickou aplikaci bude nutné jej zkombinovat s jinými postupy.

3a-5) Kompozitní materiál na bázi grafenu určený pro sorpci a záchyt radionuklidů

Partneři: Rokospol, a.s., Toseda s.r.o., ÚJV Řež a.s.

Poskytovatel: TA ČR (projekt TA04020222)

Dosažený výsledek: Projekt je zaměřen na vývoj nového, vysoce sofistikovaného kompozitního materiálu určeného pro sorpci a záchyt radionuklidů na bázi grafenu, resp. grafen-oxidu s organickými polymery. Projekt běžel 1. rokem; výstupy se očekávají v následujících letech řešení.

### **3b) Výsledky VaV dosažené na základě hospodářských smluv**

V r. 2014 bylo uzavřeno přes 30 hospodářských smluv.

### Nejvýznamnější výsledky:

Výsledek 1: Příprava nanostrukturních materiálů pro záchyt radionuklidů

Zadavatel: Ústav jaderného výzkumu, a.s.

Anotace: V rámci projektu MV ČR byly pro řešitele syntetizovány nanostrukturní materiály k testování záchytu radionuklidů.

Uplatnění: Aplikace pro záchyt radionuklidů uvolňovaných do životního prostředí lidskou činností a pro sanační činnosti při mimořádných událostech.

Výsledek 2: Metoda přípravy speciálních anorganických matic

Zadavatel: CQFD COMPOSITES, Ltd. Francie

Anotace: Byl realizován výzkum a vývoj nových anorganických matic s definovanou kinetikou síťování, který vedl k vypracování postupu přípravy a scale-up

Uplatnění: Pultruzní technologie zadavatele.

Výsledek 3: Fázová analýza produktů interakcí materiálu palivových článků při simulaci jaderné havárie

Zadavatel: ÚJV Řež, a.s.

Anotace: Fázovou analýzou pomocí práškové rentgenové difrakce bylo zjištěno složení produktu interakce Coria (směs materiálů simulujících palivové články  $UO_2$ ,  $ZrO_2$ ,  $Fe_2O_3$ ) s materiály containmentu a obalu reaktoru (ocel, beton) při haváriích typu Černobyl, Fukushima.

Uplatnění: Výsledek byl uplatněn v rámci projektu MŠMT Kontakt II LH12224 - Modelování a výzkum hypotetických nestandardních situací jaderných reaktorů nového typu

Výsledek 4: Geochemický a mineralogický rozbor nadložních zemin v lokalitách SD, a.s. ke zjištění dopadů zvětrávacích procesů na jejich stav

Zadavatel: Severočeské doly a.s., Bílina

Anotace: Analýzy rtg fluorescenční spektroskopii, stanovením kationtové výměnné kapacity a rtg difrakcí prokázaly průběh zvětrávacích procesů, které ovlivňují charakter nadložních sedimentů včetně jejich mechanických vlastností. Podstatou procesů je patrně oxidativní hydrolýza sideritu ( $FeCO_3$ ) a s ní spojený vznik volných solí a dále změny složení jílových minerálů.

Uplatnění: Výsledky umožňují vysvětlit, jak závisí odolnost sedimentů na sesouvání v řezech v nadloží, které jsou nezbytné k těžbě uhlí, a proč je labilita sedimentů závislá na složení nadloží ve vztahu k místní stratigrafii.

### **3c) Udělené patenty, užité vzory, vynálezy**

3c-1) Způsob přípravy orientovaných tenkých vrstev hexagonálních feritů

Kategorie: patent, zapsán pod číslem 304813 (PV 2012 – 919)

Jedná se o ekonomicky výhodný a jednoduchý způsob přípravy orientovaných tenkých vrstev hexagonálních feritů typu Y pro elektronická zařízení využívající elektromagnetické záření v oblasti radio-frekvencí 1 GHz až 300 GHz (GSM, satelitní komunikace a navigace, GPS, civilní a vojenská radarová technika) a vyžadující elektricky nevodivé mikrovlákné materiály s nízkými dielektrickými ztrátami. Nové

tenké vrstvy hexagonálních feritů typu Y mohou přispět k vylepšení stávajících typů mikrovlnných zařízení v případě úspěšné implementace ME prvků do těchto zařízení, díky možnosti duálního ladění jejich výkonu elektrickým a magnetickým polem.

### **3d) Odborné expertizy zpracované pro státní orgány a další instituce**

V r. 2014 byly vypracovány recenze pro mezinárodní impaktované časopisy, posudky na práce habilitační, diplomové, disertace a posudky pro grantové agentury v celkovém počtu cca 90.

## **4. Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště**

### **4a) Projekty řešené v rámci mezinárodních vědeckých programů**

4a-1) Bezpečnost separačních procesů aktinoidů / Safety of Actinide SEparation Processes (SACSESS; FP7; zahraniční partneři Francie, Španělsko, Itálie, Německo, Velká Británie, Polsko, Švýcarsko, Holandsko, Japonsko)

V rámci projektu jsou vyvíjeny metody pro eliminaci aktinoidů z jaderných odpadů. ÚACH se účastní provádění a vyhodnocování testů radiační a hydrolytické stability selektivních organických ligandů navržených a schválených pro vývoj technologického procesu.

4a-2) Zařízení pro dekontaminaci mlh ve velkém měřítku / Device for large scale fog decontamination (COUNTERFOG; FP7; zahraniční partneři Španělsko, Velká Británie, Bulharsko, Polsko, Německo, Belgie)

Projekt je zaměřen využití nanostrukturních dopovaných oxidů a chalkogenidů při dekontaminaci životního prostředí.

4a-3) Nanokompozity grafen-oxid kovu pro efektivnější dekontaminaci toxických chemických látek/ Graphene-metal oxide nanocomposites for enhanced decontamination of toxic chemical agents (Green decon; SPS NATO; zahraniční partner Uppsala University, Švédsko)

V rámci projektu je vyvíjena technologie pro přípravu materiálů na bázi nanokompozitů grafen-oxid kovu pro dekontaminaci toxických chemických látek.

### **4b) Konference s mezinárodní účastí, které ÚACH (spolu)pořádal**

4b-1) International Meeting on Boron Chemistry, IMEBORON XV

Hlavní pořadatel: ÚACH AV ČR, v.v.i.

Počet účastníků celkem/z toho ze zahraničí: 216/191

Na konferenci byly prezentovány a diskutovány recentní výsledky výzkumu z oblasti chemie sloučenin boru.

4b-2) ) 5. mezioborová konference ALMA: Interpretace analýz výtvarného umění v různých kontextech

Pořadatelé: Akademie výtvarných umění v Praze, ÚACH AV ČR, v. v. i.

Počet účastníků celkem/z toho ze zahraničí: 96/21

Anotace: Účastníci se zabývali přenosem výtvarných a technologických dovedností v historickém kontextu a uplatněním výsledků výzkumu v restaurátorské praxi.

#### 4b-3) Zimní škola synchrotronové radiace

Pořadatelé: Ministerstvo školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky, Slovenská spektroskopická spoločnosť, STU Bratislava, ÚACH AV ČR, v. v. i.

Počet účastníků celkem/z toho ze zahraničí: 84/70

Anotace: Škola byla zaměřena na výukové přednášky věnované synchrotronovému záření a jeho využití v různých oblastech výzkumu. Rovněž byly prezentovány informace o možných tématech výzkumu, o experimentálních technikách, aplikacích.

#### 4b-4) Mössbauerova spektroskopie v materiálovém výzkumu

Pořadatelé: ÚACH AV ČR, v. v. i., Slovenská spektroskopická spoločnosť, FEI STU Bratislava

Počet účastníků celkem/z toho ze zahraničí: 68/24

Anotace: Workshop byl zaměřen na výměnu zkušeností v oblasti materiálového výzkumu pomocí Mössbauerovy spektroskopie.

#### **4c) Aktuální dvoustranné dohody se zahraničními pracovišti**

4c-1) Téma: Příprava a výzkum kovových povrchů modifikovaných boranovými a heteroboranovými klastry; partner University of California in Los Angeles / California NanoSystems Institute, USA

4c-2) Téma: Výzkum fotokatalyzátorů a látek pro stechiometrický rozklad polutantů; partner Uppsala University, Ångströmlaboratoriet, Švédsko

4c-3) Téma: Sorpční materiály pro environmentální aplikace; partner Universidad Carlos III de Madrid, Španělsko

4c-4) Téma: Charakterizace magnetických materiálů; partner Slovenská Technická Universita v Bratislavě, Fakulta elektrotechniky a informatiky, Slovenská republika

4c-5) Téma: Modifikace textilií boranovými a heteroboranovými klastry a stříbrnými nanočásticemi; partner Albstadt-Sigmaringen University, Department of Engineering, Textile Product Technology, Německo

4c-6) Téma: Charakterizace produktů mechanochemicky aktivovaných reakcí oxidů kovů; partner Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, Centro de Investigaciones Científicas „Isla de la Cartuja“, Sevilla, Španělsko

4c-7) Téma: Struktura, vlastnosti a využití produktů získaných z důlních vod a sedimentů; partner Technická universita Zvolen, Fakulta ekológie a environmentalistiky, Slovenská republika

#### **4d) Další vědecké spolupráce se zahraničními partnery:**

National Environmental Engineering Research Institute (NEERI), Nagpur, Indie (molekulární design, syntéza a studium katalytických a fotokatalytických materiálů pro environmentální aplikace);

Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg, Strasbourg, Francie (příprava a charakterizace nanokompozitů);

Laboratoire des Matériaux Inorganiques, Université Blaise Pascal, Aubiere Cedex, Francie (příprava a vlastnosti polymerních nanokompozitů; popis orientace molekul v

mezivrství podvojných hydroxidů);

Inst. Química-Física "Rocasolano", CSIC, Madrid, Španělsko (studium interakcí karboranových klastrů s biomolekulami);

University of York, VB (strukturní charakterizace karboranů pomocí elektronové difrakce);

Heriot-Watt University, Edinburgh, VB (chemie karboranů, metallakarboranů a jejich derivátů pro modifikace kovových povrchů);

Univ Zaragoza, Institut Univ. Catalis Homogenica IUCH, Zaragoza, Španělsko (spolupráce na přípravě látek a studiu katalytických reakcí s použitím modifikovaných komplexů přechodných kovů s thiaborany jako ligandy).

#### **5. Vzdělávací činnost pracovníků ústavu**

Účast pracovníků ústavu při uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů je popsána v kapitole 2. Pozornost byla věnována rovněž studentům středních škol, pro které pořádáme vybrané přednášky.

#### **IV. Hodnocení další a jiné činnosti:**

V rámci jiné činnosti byly v r. 2014 realizovány smlouvy o dílo v hodnotě 708 tis. Kč.

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

V r. 2014 ani v předchozím roce nebyly zjištěny nedostatky v hospodaření.

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

Ústav hospodařil v r. 2014 s vyrovnaným rozpočtem.

Audit za r. 2014 byl proveden firmou Diligens, s.r.o.. Ve Zprávě auditora o ověření účetní závěrky stojí, že účetní závěrka podává věrný a poctivý obraz aktiv a pasiv Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i. k 31. 12. 2014, nákladů a výnosů a výsledků jejího hospodaření za r. 2014 v souladu s českými účetními předpisy. Na přiloženou účetní závěrku byl vydán výrok „bez výhrad“.

Výše institucionální neinvestiční dotace pro r. 2014 schválená Akademickým sněmem AV ČR byla přibližně o 1 % vyšší než r. 2013. Vedle institucionální dotace

\*) Údaje požadované dle § 21 zákona 563/1991 Sb., o účetnictví, ve znění pozdějších předpisů.



poskytované z rozhodnutí zřizovatele byla v r. 2014 část rozpočtu ústavu (cca 48 % neinvestičních nákladů) tvořena účelovými prostředky (7. RP, SPS NATO, MŠMT, MPO, GA ČR, TA ČR).

Vedení ústavu věnuje setrvalou pozornost provozním i personálním opatřením směřujícím ke snížení nákladů na provoz ústavu. Po rozsáhlých stavebních rekonstrukcích provedených v minulých letech jsme připravili projekt zateplení ústavní mechanické dílny, který se bude realizovat v r. 2015.

I přes omezené finanční možnosti bylo v r. 2014 doplněno přístrojové vybavení ústavu o přenosný rentgenový fluorescenční spektrofotometr pro práce v terénu, které provádí pracovníci Laboratoře environmentální geochemické analýzy a sušičku rozpouštědel, kterou budou využívat pracovníci Oddělení materiálové chemie a Oddělení syntéz. Velkým přínosem pro Oddělení syntéz bude pořízení velmi nákladného NMR spektrometru, s jehož návrhem jsme uspěli v r. 2014 v konkurzu AV na pořízení nákladných přístrojů a bude financován v r. 2015 z dotace AV ČR s 20% účastí ústavu.

Vedení ústavu důsledně dbá na vyhledávání možností aplikací výsledků badatelského výzkumu a uplatňování práv duševního vlastnictví v oblasti aplikovaných výsledků. Kromě smluv o dílo v rámci jiné činnosti (708 tis. Kč, viz výše) byl v r. 2014 v rámci hlavní činnosti realizován smluvní výzkum ve výši 897 tis. Kč a příjmy z uzavřených licenčních smluv činily 1 652 tis. Kč. Příjmy ze smluv a licencí doplňují rozpočet ústavu tvořený převážně dotacemi ze státních prostředků.

## **VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště:**

Vývoj činnosti pracoviště bude v souladu s jeho posláním a vývojem oboru anorganické chemie v mezinárodním kontextu směřován na výzkum nových sloučenin s potenciálními aplikacemi cílenými na zlepšení kvality života společnosti. Bude reflektovat společenskou poptávku po sloučeninách pro biomedicínské aplikace, materiálech se specifickými fotokatalytickými, optickými, fotochemickými a baktericidními vlastnostmi a po progresivních keramických materiálech využívajících domácí zdroje surovin. Pozornost bude věnována též řešení environmentálních problémů spočívajících v monitorování, ochraně a zlepšení životního prostředí. Současné vědecké zaměření ústavu sleduje uvedené trendy a svými výsledky spoluurčuje jejich rozvoj. Na badatelský výzkum v řadě případů navazuje výzkum a vývoj s cílem využití výsledků při inovacích stávajících technologických postupů a zavádění nových vyspělých technologií.

Aktivita v oblasti základního výzkumu sloučenin boru bude zaměřena na vývoj syntetických metod přípravy strukturně nových typů karboranových klastrů, které mohou tvořit, spolu s cyklodienylovými a arenovými ligandy, vysoce stabilní metalakarboranové sendvičové struktury, nebo ty, které mohou sloužit jako stavební jednotky využitelné v nanochemii a farmakologii. Budou prováděny strukturní studie nových typů látek založené na kvantově-chemických výpočtech a difrakčních metodách. Pozornost bude dále věnována syntéze a strukturní charakterizaci nových derivátů makropolyhedrálních boranových klastrů a jejich interakci se světlem, zejména fluorescenčním vlastnostem, excitovaným stavům a generaci singletového kyslíku.



V oblasti potenciálních aplikací boranových sloučenin bude pokračovat vývoj syntézy biologicky aktivních klastrových sloučenin bóru se zaměřením na konkrétní terapeuticky významné cíle, především isoenzymy Karbonické Ahydrázy. Pracovníci se budou dále podílet na experimentálním a teoretickém studiu způsobu vazby klastrových sloučenin bóru do molekul terapeuticky významných enzymů, interakcemi nových molekul s modelovými komponentami biologických systémů a vyhodnocení účinnosti látek a jejich farmakologických vlastností. Ve spolupráci s firmou Katchem, s.r.o. se budou pracovníci podílet v rámci projektu TA ČR na vývoji nových technologií pro výrobu základních *kloso*-borátových aniontů a jejich derivátů pro aplikace v elektrochemii, katalýze a medicíně. V oblasti modifikace a ochrany kovových povrchů budou studovány interakce nových funkčních thiolových derivátů s povrchy kovů při vytváření tenkých filmů a monomolekulárních vrstev, fyzikální vlastnosti takto modifikovaných povrchů a účinnost ochrany povrchů proti korozi. Dále bude pokračovat spolupráce na technologickém vývoji selektivních extrakčních činidel pro izolaci minoritních aktinidů ze směsí štěpných produktů.

Materiálový výzkum bude v roce 2015 zaměřen na přípravu nanokompozitních pigmentů, sorbentů, katalyzátorů, funkčních vrstev a kvantových teček na bázi grafenu a analogů grafenu. Bude pokračovat výzkum orientovaný na přípravu vysoce účinných fotokatalyzátorů na bázi dopovaných  $\text{TiO}_2$  a  $\text{ZnO}$ ,  $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$  a  $\text{C-TiO}_2$  s uplatněním v oblasti samočisticích a ekologických nátěrů a při ochraně staveb a historických památek. Bude pokračovat výzkum materiálů pro stechiometrickou a fotokatalytickou degradaci environmentálních polutantů a rovněž výzkum materiálů na bázi oxidů přechodných kovů s termoelektrickými vlastnostmi, multiferoickým chováním a core-shell struktur s magnetickými, katalytickými a optickými vlastnostmi.

Pozornost bude rovněž zaměřena na přípravu nanodestiček vrstevnatých hydroxidů přechodných kovů a studium jejich elektrochemických vlastností, manipulace s hydroxidovými nanovrstvami a jejich tepelné přeměny na nanostrukturální částice fotokatalyticky aktivního  $\text{ZnO}$ , přípravu organometalických sítí majících zajímavé fotofyzikální vlastnosti a porozitu, polymerní fotoaktivní nanovlákná s využitím v baktericidních tkaninách a výzkum fotofyzikálních vlastností šestijaderných molybdenových klastrů pro nové senzitivátory a senzory.

Další úkoly v oblasti materiálové chemie jsou zaměřeny na vývoj materiálů na bázi hlinitokřemičitanových matic pro vysoce kvalifikované aplikace v oblasti pultruzní technologie, jaderné energetiky, stavebnictví a žárovzdorných materiálů. V provozních podmínkách bude testováno využití  $\text{ZnO}_2$  solů pro povrchové úpravy stavebních materiálů. Dobře vybavené pilotní centrum ústavu umožňuje ověřování vyvíjených technologií v čtvrtprovozním měřítku, což usnadňuje transfer know-how do výroby průmyslových partnerů.

V oboru environmentální geochemie bude pokračovat studium znečištěných povodňových sedimentů řek Ohře, Ploučnice, Litavky a Jizery s cílem popsat distribuci polutantů v nivě, rekonstruovat historii znečištění a odhadnout míru sekundárního znečišťování přepracováním již uložených sedimentů. Dále bude pokračovat rekonstrukce vývoje sedimentace v malých povodích na Prachaticku a využívání vlastního *know how* při analýzách sedimentů ve spolupráci s českými univerzitními pracovišti.

V rámci výzkumu kulturního dědictví bude pokračovat testování speciálních postupů

mikroanalýzy jílových minerálů v podkladových vrstvách výtvarných děl jako součást provenienčních analýz anonymních obrazů. Bude pokračovat i experimentální činnost zaměřená na procesy chemické degradace pigmentů, vedoucí k barevným změnám či mechanické nestabilitě maleb (např. proces tvorby kovových mýdel nebo přeměna auripigmentu na arseničnany). Výsledky metodického výzkumu pak budou využívány při komplexním mezioborovém studiu významných děl v českém a evropském kontextu.

V r. 2015 jsou výše uvedené problematiky řešeny s finanční podporou EC (rámcové programy), SPS NATO, GA ČR, TA ČR, AV ČR, MŠMT a MPO.

### **VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí:**

Pracovníci ústavu se dlouhodobě podílejí na vývoji technologických procesů zaměřených na řešení problému nakládání s vysoce aktivním jaderným odpadem, který vzniká při zpracování vyhořelých jaderných paliv. Optimálním řešením se zdá přepracování paliva v uzavřeném cyklu, který by vedl k důsledné eliminaci nejvíce radiotoxických štěpných produktů (minoritních aktinoidů, především Am) a výrazně (až tisíckrát s ohledem na dobu nezbytného uložení a šedesátkrát z hlediska objemu) snížil objem radioaktivních odpadů ukládaných v povrchových i hlubinných úložištích. Od roku 2013 se v rámci projektu SACSESS (7. RP) podílíme na expertních studiích zaměřených na hydrolytickou a radiační stabilitu extrakčních systémů navržených pro technologický proces selektivní separace minoritních aktinoidů. Stabilita extrakčního systému je přímo spojena s bezpečností procesu, na níž je projekt SACSESS primárně zaměřen.

Naše pracoviště je zapojeno do široké mezinárodní spolupráce zaměřené na řešení fundamentálních otázek souvisejících s těžkými haváriemi v jaderné energetice a ochranou před jejich následky, zejména v oblasti popisu fázových rovnováh v taveninách oxidů v systému Fe-Zr-U a také poznání průběhu jejich reakcí se složkami betonových konstrukcí reaktorů.

Pracovníci ústavu se intenzivně podílejí na výzkumu nanostrukturních oxidů a sulfidů s fotokatalytickým účinkem, které za účasti slunečního záření aktivně rozkládají polutanty. V rámci mezinárodního projektu COUNTERFOG (7.RP) spolupracujeme na vývoji dekontaminačního zařízení pro řešení krizových událostí. Projekt SPS NATO je zaměřen na vývoj technologie výroby nanokompozitů pro efektivnější dekontaminaci toxických chemických látek

Originální technologie výroby fotokatalytického  $\text{TiO}_2$  je využívána firmou Rokospol při výrobě nátěrové hmoty se samočisticími vlastnostmi (Detoxycolor).

Další aktivity využitelné v oblasti ochrany životního prostředí:

Budeme se podílet na zavedení výroby fotokatalytického materiálu na bázi  $\text{SiO}_2$  –  $\text{TiO}_2$  a optimalizaci jeho vlastností z hlediska použití (např. vývoj fotokatalytických systémů pro povrchové úpravy stavebních materiálů a ochranu památek a pro čističku obtížných odpadních vod, vznikajících při defektoskopii).

Popsali jsme vývoj kontaminace řeky Ploučnice v důsledku těžby uranu v oblasti Stráže pod Ralskem v 70. a 80. letech minulého století a zjistili jsme jednoznačný

vliv chyb v technologii těžby i nakládání s odpadními vodami. V dané oblasti by neměla být prováděna revitalizační opatření, dokud neproběhne v každém potenciálně ovlivněném místě podrobný průzkum. Zjistili jsme místa, kam se uložila kontaminace rtuť (z továrny v Marktredwitz v Německu) a uranem (z havarovaného odkaliště uranového průmyslu v Nejdku) v sedimentech řeky Ohře. Pokračuje tak dosud opomíjené mapování stavu významného historického znečištění českých řek, které by mělo být podkladem k doporučení před zásahy do říčních systémů.

K ochraně životního prostředí přispíváme i při vlastní experimentální činnosti a provozu ústavu. Důsledně dbáme na technické zajištění prevence znečištění ovzduší a vod chemickými látkami, třídění odpadu a jeho ekologickou likvidaci profesionálními firmami.

## IX. Aktivity v oblasti pracovněprávních vztahů:

Základní personální údaje:

k 31. 12. 2014 bylo v ústavu zaměstnáno 93 fyzických osob (FO).

**Struktura zaměstnanců ústavu**

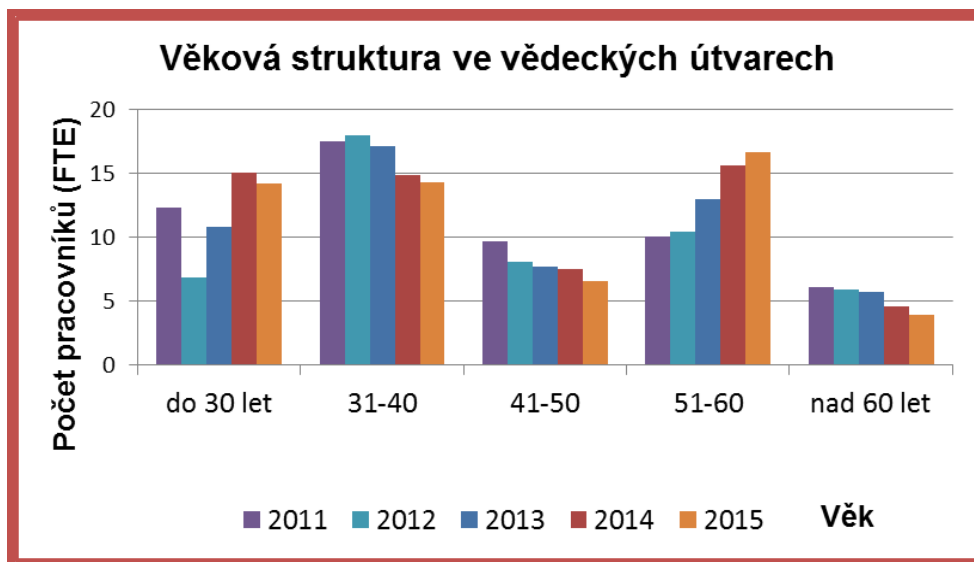
| Počet zaměstnanců<br>(přepočtený počet na celý úvazek) |                              | celkem | z toho<br>muži | z toho<br>ženy |
|--|------------------------------|--------|----------------|----------------|
|  |                              | 69.0   | 38.4           | 30.6           |
| v tom  | výzkumní pracovníci          | 57.1   | 36.5           | 20.6           |
|  | administrativní pracovníci   | 9.5    | 0              | 9.5            |
|  | techničtí a další pracovníci | 2.4    | 1.9            | 0.5            |

Z uvedené tabulky vyplývá, že 83 % pracovní kapacity zaměstnanců ústavu tvořili pracovníci ve výzkumných týmech. Z těchto pracovníků (FO) mělo 87 % ukončené VŠ vzdělání a z nich bylo 51 % vědeckých pracovníků (získali PhD titul nebo jeho ekvivalent) a 25 % studentů doktorského studia.

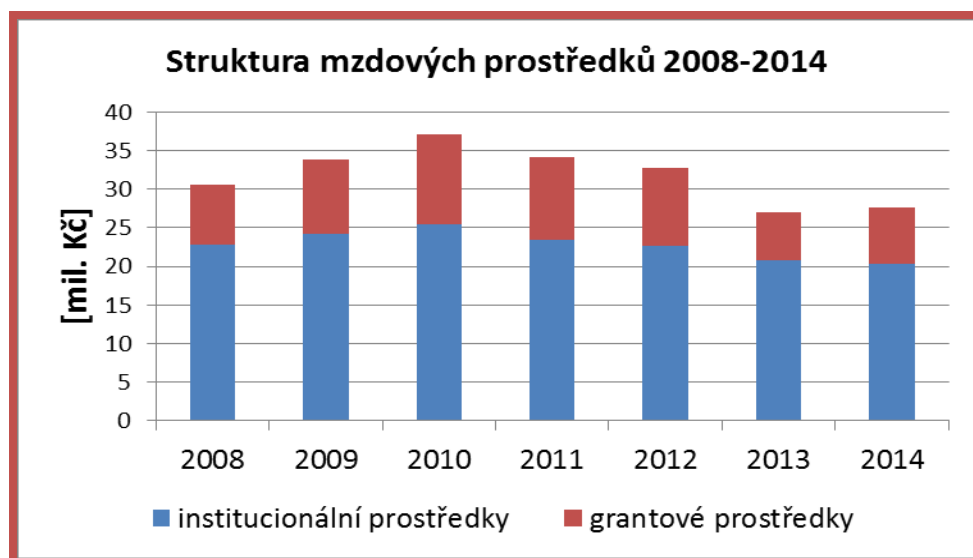
V r. 2014 bylo ukončeno 11 pracovních poměrů pracovníků výzkumných útvarů, z toho 3 seniorů. Bylo přijato 11 nových pracovníků výzkumných útvarů, z toho 9 ve věku do 35 let, z nich 7 pregraduálních studentů a studentů DSP na částečný pracovní úvazek. Při přijímání nových pracovníků je kladen důraz především na odbornost, vědeckou úroveň a perspektivu pracovníka.

Vedení ústavu věnuje setrvalou pozornost studentům DSP i pregraduálním studentům, jejichž práce probíhá pod supervizí ústavních školitelů. Studenti spolupracují při řešení výzkumných projektů a aktivně se účastní prezentace výsledků včetně účasti na mezinárodních konferencích. Po úspěšné obhajobě diplomové práce nebo disertace mají ti nejschopnější možnost zahájit vlastní vědeckou kariéru na ústavu. V r. 2014 bylo na ústavu zaměstnáno 11 studentů DSP a 8 pregraduálních studentů; sedm studentů kombinovaného studia bylo zaměstnáno na plný úvazek, studenti řádného studia DSP a pregraduální studenti na částečný pracovní úvazek, zpravidla 10-50 %.

Věková struktura výzkumných pracovníků ústavu je stále příznivá. V následujícím obrázku je zobrazen vývoj věkové struktury výzkumných pracovníků v letech 2011-2014 s výhledem na rok 2015. Počet fyzických osob v nejnižší věkové kategorii je ve skutečnosti více než dvojnásobný, protože významný podíl těchto pracovníků tvoří studenti pracující na částečný pracovní úvazek. Průměrný věk pracovníků ve vědeckých útvarech zůstává ve srovnání s r. 2013 přibližně stejný, 42,6 let.



Mzdové prostředky z dotace zřizovatele v r. 2014 činily cca 65 % z celkem vyplacených mzdových prostředků. Průměrná mzda ve výši 38 064 Kč byla o cca. 2 tis. vyšší než v předchozím roce a stále přesahuje celoakademický průměr.



Úsilí vedení ústavu je zaměřeno na rozvoj ústavu a dosažení excelence v oboru. Periodické sledování a hodnocení produktivity a kvality výsledků pracovních týmů, které je prováděno od r. 1990 umožňuje stanovit nejen současný stav, ale i trendy. Motivační opatření spočívají v individuálním finančním ohodnocení a podpoře nejlepších týmů a jednotlivců přístrojovým vybavením a personálním posílením.

**X. Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb., o svobodném přístupu k informacím**



**Výroční zpráva o poskytování informací za rok 2014**

**Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i.  
250 68 Husinec-Řež**

Výroční zpráva o poskytování informací je zpracována na základě § 18 zákona č. 106/1999 Sb., o svobodném přístupu k informacím, ve znění pozdějších předpisů (dále jen „zákon“), který stanovuje Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i. (dále jen „ÚACH“) povinnost každoročně zveřejnit údaje o této činnosti vždy do 1. března za předcházející kalendářní rok.

1. Počet podaných žádostí o informace

**1**

2. Počet vydaných rozhodnutí o odmítnutí žádosti

**0**

3. Počet podaných odvolání proti rozhodnutí

**0**

4. Opis podstatných částí každého rozsudku soudu ve věci přezkoumání zákonnosti rozhodnutí povinného subjektu o odmítnutí žádosti o poskytnutí informace a přehled všech výdajů, které povinný subjekt vynaložil v souvislosti se soudními řízeními o právech a povinnostech podle tohoto zákona, a to včetně nákladů na své vlastní zaměstnance a nákladů na právní zastoupení

**Nebyl vydán žádný rozsudek soudu.**

5. Výsledky řízení o sankcích za nedodržení zákona bez uvádění osobních údajů

**Nebylo vedeno žádné sankční řízení**

6. Výčet poskytnutých výhradních licencí včetně odůvodnění nezbytností poskytnutí výhradní licence

**Nebyla podána žádná žádost, která by byla předmětem ochrany autorského práva a vyžadovala poskytnutí licence.**

7. Počet stížností podaných podle § 16a zákona č. 106/1999 Sb., důvody jejich podání a stručný popis způsobu jejich vyřízení

**Nebyla podána žádná stížnost.**

8. Další informace vztahující se k uplatňování tohoto zákona

**0**

Výroční zpráva ÚACH AV ČR, v. v. i., o poskytování informací podle zákona, bude začleněna do Výroční zprávy o činnosti a hospodaření ÚACH AV ČR, v. v. i., za rok 2014 jako její samostatná část s názvem „Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb., o svobodném přístupu k informacím“.

27. února 2015



Ing. Jana Bludská, CSc.  
ředitelka

V Řeži, 5. června 2014



podpis ředitele pracoviště AV ČR

**Přílohou výroční zprávy je účetní závěrka a zpráva o jejím auditu**