



## **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 2017**

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 30.5. 2018

Radou pracoviště schválena dne: 31.5. 2018

## 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,  
uvolněna z funkce k 24. březnu 2017,

Rada pracoviště zvolena 7. 12. 2016 ve složení:

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

místopředseda: Mgr. David Hradil, Ph.D., ÚACH AV ČR, v. v. i.

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

Dr. RNDr. Petr Bezdička, ÚACH AV ČR, v. v. i.

Ing. Jana Bludská, CSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

RNDr. Michal Dušek, CSc., FzÚ AV ČR, v. v. i.

Ing. Petra Ecorchard, Ph.D., ÚACH AV ČR, v. v. i.

Ing. Kamil Lang, CSc., DSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

Prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc., Masarykova univerzita, Brno

Prof. Dr. Ing. David Sedmidubský, CSc., VŠCHT Praha

Ing. Oldřich Schneeweiss, DrSc., ÚFM AV ČR, v. v. i.

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

Dozorčí rada jmenována dne 1. května 2017 ve složení:

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

místopředseda: RNDr. Bohumír Grüner, CSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

členové: Ing. Petr Bobák, CSc., ÚŽFG AV ČR, v. v. i.

Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, VŠCHT Praha

Ing. Jiří Kotek, Dr., ÚMCH AV ČR, v. v. i.

### Změny ve složení orgánů:

Shromáždění výzkumných pracovníků zvolilo 7. 12. 2016 Radu ústavu v novém složení (viz výše) pro funkční období 2017-2022. Ing. Kamil Lang, CSc., DSc. byl pověřen řízením ústavu od 25. března 2017.

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

### **Ředitelka/ředitel:**

V r. 2017 byly zajišťovány především následující agendy:

- plnění výzkumných úkolů a postupů řešení grantových projektů včetně prezenčních kontrol aktivit a personálního zabezpečení v jednotlivých odděleních a laboratořích,
- vypracování koncepce výzkumné činnosti Ústavu pro roky 2017-2022
- řádné vedení účetnictví,
- vypracování návrhů žádostí o podporu nákladných přístrojů v r. 2018.
- výběrová přijímací řízení vysokoškolsky vzdělaných pracovníků,
- periodická činnost a kontrola na úseku bezpečnosti práce, prevence rizik a ochrany zdraví při práci.

Účast na všech zasedáních Rady ústavu a zasedání Dozorčí rady.

V průběhu r. 2017 byly vydány tři interní předpisy (IP), IP č. 92, týkající se náležitostí nutných pro zajištění zahraničních pracovních cest a účasti na tuzemských konferencích, IP č. 93, O nakládání s nebezpečnými chemickými látkami a IP č. 94, Mzdový předpis. Byl vydán jeden příkaz ředitele - k provedení inventarizace hospodářských prostředků v r. 2017. Dále bylo vydáno 5 směrnic – Metodika vykazování skutečných nepřímých nákladů projektů výzkumu a vývoje v r. 2017, Organizační zabezpečení, použití a účtování finančních prostředků při řešení projektů v programech na podporu aplikovaného výzkumu, experimentálního vývoje a inovací Technologické agentury ČR, Etický kodex výzkumných pracovníků, Organizační zabezpečení, použití a účtování finančních prostředků při řešení projektu v programu INTER-EXCELLENCE (MŠMT) a směrnice Pro uchovávání bezpečnostních listů a prokazatelné seznámení se s jejich obsahem.

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. 2018.

Přístrojové vybavení ústavu bylo v r. 2017 doplněno o přístroj pro stanovení měrného povrchu a distribuce pórů v Oddělení materiálové chemie a infračervený mikroskop s imagingem pro Akademickou laboratoř materiálového průzkumu uměleckých děl, které byly pořízeny z dotace AV na nákup nákladných přístrojů s 20% spoluúčastí ústavu.

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. 2017 bylo řešeno 26 projektů VaV v programech GA ČR (12), MPO (3), TA ČR (5), MŠMT (3), 7RP EU (1), Horizont 2020 (1) a SPS NATO (1). Účelové prostředky plynoucí z podpory zmíněných poskytovatelů do rozpočtu představovaly cca 40 % neinvestičních nákladů ústavu. Mzdové prostředky vyplacené z účelových dotací činily cca 30 %.

V r. 2017 byl ústavu udělen 1 patent a 1 užitný vzor. Byla podána 1 patentová přihláška.

## **Rada pracoviště:**

V r. 2017 se uskutečnilo 9 jednání Rady ÚACH AV ČR v. v. i.:

75. jednání, 4. 1. 2017

- Rada se poprvé sešla v novém složení, proběhla volba předsedy a místopředsedy. Rada projednala náležitosti nadcházejících voleb do AR a VR AV ČR.

76. jednání, 23. 2. 2017

- Byl připraven návrh na jmenování tajemníka Rady. Rada dále projednala a schválila změnu Mzdového předpisu včetně nových tarifních rozpětí a zabývala se přípravou výběrového řízení na funkci ředitele ústavu.

77. jednání, 28. – 29. 3. 2017, *per rollam*

- Rada projednala přihlášky do veřejné soutěže GA ČR pro rok 2018. 13 návrhů z celkového počtu 16 Rada doporučila k podání.

78. jednání, 27. 4. 2017

- Rada se seznámila se stávající situací ve Společné laboratoři chemie pevných látek a nedoporučila vedení ústavu pokračovat v jednáních o zřízení společného pracoviště ÚACH s Univerzitou Pardubice. Vedoucí Oddělení syntéz a Laboratoře environmentální geochemické analýzy seznámili Radu se svými vizemi o dalším směřování svých týmů. Rada stanovila časový plán volby ředitele

79. jednání, 21. – 25. 4. 2017, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila k podání dvě přihlášky do veřejné soutěže TA ČR ZÉTA a NAKI pro rok 2018.

80. jednání, 4. – 9. 5. 2017, *per rollam*

Rada projednala a doporučila k podání návrh projektu do veřejné soutěže TA ČR EPSILON pro rok 2018.

81. jednání, 13. června 2017

- Rada projednala a schválila Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ústavu za r. 2016, seznámila se se zprávou auditora o ověření účetní závěrky za r. 2016, projednala a schválila rozpočet výnosů a nákladů na r. 2017 a střednědobý výhled 2018-2019 a schválila přesun hospodářského výsledku za r. 2016 do Fondu reprodukce majetku a do Rezervního fondu. Rada se zabývala návrhem složení výběrové komise pro výběrové řízení na funkci ředitele ústavu.

82. jednání, 13. září 2017

- Rada projednala doporučení komise pro výběr ředitele ústavu. Předseda Rady informoval Radu o průběhu řízení. Oba uchazeči, D. Hradil a D. Hnyk, se vyjádřili ke svým vystoupením před výběrovou komisí, přednesli své vize o vedení a budoucím směřování ústavu a zodpověděli dotazy členů Rady. V tajném hlasování se Rada shodla na návrhu předsedkyni AV ČR na jmenování D. Hradila ředitelem ústavu. Rada dále projednala a doporučila přihlášku Suzan El Ankar do Programu podpory perspektivních lidských zdrojů – Mzdová podpora postdoktorandů na pracovištích AV ČR.

83. jednání, 1. 12. 2017

- Rada projednala a schválila Koncepti výzkumné činnosti 2017-2022, schválila nový Mzdový předpis, seznámila se s činností Rady pro akademická média a popularizaci, vzala na vědomí rozhodnutí Akademické rady o nejmenování D. Hradila do funkce ředitele ústavu a shodla se na vyhlášení dalšího výběrového řízení v lednu 2018

#### **Dozorčí rada:**

V r. 2017 se uskutečnila 2 jednání Dozorčí rady ÚACH AV ČR v. v. i.

Jednání per rollam k datu 28. dubna 2017

Dozorčí rada schválila hodnocení manažerských schopností ředitelky ÚACH, AV ČR, v. v. i. dle přiloženého návrhu.

16. zasedání, 24. května 2017

Dozorčí rada

- vyslovila souhlas s Výroční zprávou o činnosti a hospodaření ÚACH AV ČR, v. v. i. v r. 2016,
- vzala na vědomí zprávu auditora o ověření účetní závěrky za r. 2016,
- vyslovila souhlas s návrhem rozpočtu nákladů a výnosů na rok 2017,
- určila auditorem na rok 2017 firmu DILIGENS pod vedením Ing. P. Císařové, CSc.,
- zhodnotila manažerské schopnosti ředitelky ústavu.

## **II. Informace o změnách zřizovací listiny:**

V r. 2017 nedošlo ke změně zřizovací listiny.

## **III. Hodnocení hlavní činnosti:**

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

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

V roce 2017 byla výzkumná činnost ústavu zaměřena na následující oblasti:

- Fotoaktivní anorganické molekuly a materiály
- Chemie boranových sloučenin
- Nové materiály pro udržitelné životní prostředí
- Ochrana kulturního dědictví
- Geochemická analýza sedimentů
- Aplikovaný výzkum

## Fotoaktivní anorganické molekuly a materiály

Výzkum se zaměřuje na vývoj, syntézu a charakterizaci nových molekul, nanostrukturálních materiálů a (nano)materiálů mající luminiscenční a fotosensitizační vlastnosti (fluorescence, fosforescence, teplotně závislé luminiscenční vlastnosti, etc.). Hlavní důraz je kladen na kritické parametry jako například na stabilitu ve vodě, fotostabilitu, nízkou toxicitu, fototoxicitu, biokompatibilitu s ohledem na jejich využití pro stabilní luminiscenční materiály nebo v biologii.

Z fotoaktivních typů byly studovány následující systémy

- Molekulové klastry přechodných kovů Mo, Re a Cu s cílem vyvinout nové biomateriály s fotodynamickými a radiosensitizačními vlastnostmi pro fotodynamickou léčbu, kontrastní materiály pro rentgenové záření a lokální detekci kyslíku.
- Materiály na bázi porfyrinových molekul s organizovanou strukturou, tzv. kovalentních organických sítí a anorganických polymerů. Základním záměrem bylo získat stabilní struktury mající luminiscenci a schopnost produkovat singletový kyslík pro fotodynamické aplikace (antibakteriální vrstvy, fotodynamická terapie, sensing kyslíku).
- Luminiscenční boranové molekuly mají účinnou a stabilní laserovou emisi a mohou být použity jako alternativa v současných laserových zařízeních. Proto byla pozornost zaměřena na přípravu nových klastrů a popis jejich fotofyzikálních vlastností v součinnosti s využitím predikčního potenciálu kvantově chemických výpočetních metod, a dále tenkých filmů luminiscenčních boranů v polymerních maticích pro luminiscenční solární koncentrátory.

## Chemie boranových sloučenin

Výzkum boranů je zaměřen na studium boranových klastrů s využitím v biomedicíně, optice, při ochraně povrchů a jako činidla pro extrakci radionuklidů z vyhořelých jaderných paliv. Předmětem studia byla zejména

- Systematická syntetická chemie karboranů a metallaboranů orientovaná na design nových biologicky aktivních sloučenin a materiálů. Další problematikou byla syntéza racemických boranových klastrů, vývoj metod jejich enancioseparace a sledování interakcí s modelovými chirálními hostiteli.
- Biologicky aktivní borany jako selektivní inhibitory pro protinádorovou terapii a zobrazovací metody v onkologii. Pokračovala optimalizace struktur inhibitorů a studium strukturálních faktorů umožňujících přestup přes biologické membrány.
- Boranové nebo karboranové klastry jako dvourozměrné struktury samoorganizované na površích s využitím při ochranu povrchů kovů a pro design funkčních nanosystémů pro molekulární rozpoznávání nebo elektroniku.
- Teoretická chemie polyhedrálních boranů využívající paramagnetická  $^{11}\text{B}$  NMR spektra s vysokým rozlišením ke stanovení elektronických struktur heteroboranů a predikci vhodných míst k možné substituci.
- Chemie (poly)heterocyklických sloučenin zaměřená na syntézu nových heterocyklických sloučenin obsahujících bór, křemík, germanium, cín, kyslík, síru a dusík v různých kombinacích s potenciálním využitím v molekulární elektronice.

## Nové materiály pro udržitelné životní prostředí

Výzkumné úsilí je v této oblasti věnováno hledání nových materiálů pro environmentální aplikace při čištění kontaminovaného vzduchu, povrchových vod a půdy v reálných podmínkách. Studovány byly především

- Fotokatalytické materiály pro degradaci polutantů s ohledem na jejich aktivitu, stabilitu, selektivitu, kinetiku rozkladu a degradační mechanismus. Kromě nanostrukturovaného oxidu titaničitého v různých modifikacích jsou testovány i kompozity s grafenem pro účinné odbourávání polutantů včetně aromatických bifenylnů a dioxinů.
- Reaktivní sorbenty pro dekontaminaci organofosforečných sloučenin včetně chemických bojových látek a cytostatik. Výzkum byl soustředěn na stabilitu sorbentů v různých matricích, rozpouštědlech a tenkých filmech, popis mechanismů degradačních procesů a vliv reakčních podmínek se zřetelem k jejich praktickému využití.
- Vrstevnaté materiály (grafen, vrstevnaté hydroxidy, MAX fáze) – jejich syntézy, delaminace, příprava kompozitů s vysokou sorpční kapacitou pro radionuklidy a s bariérovými vlastnostmi.
- Koordinační polymery resp. organokovové sítě složené převážně se Zr(IV) a z ligandů, které přinášejí funkci jako významně zvýšenou stabilitu ve vodném prostředí, biokompatibilitu a fototoxicitu. Dále tyto materiály byly vyvíjeny v kombinaci s polymery pro separaci plynů.
- Syntézy multiferoických a termoelektrických materiálů a kompozitů jak ve formě filmů tak i keramiky.

## Ochrana kulturního dědictví

Příspěvkem ke snaze o zachování kulturního dědictví je multidisciplinární výzkum využívající poznatků moderní anorganické chemie v materiálové mikroanalýze, jejímž cílem je stanovit složení barev a podkladových vrstev uměleckých předmětů. Výsledky analýz pomáhají určit stáří a provenienci díla, popsat mechanismy degradace materiálů a navrhnout vhodné postupy pro restaurování. Pozornost byla věnována zejména

- Vývoji metodologie mikroanalýzy pigmentů a podkladových materiálů, zahrnující moderní neinvazivní metody, které mohou být použity *in situ*, se zaměřením na detekci stopových prvků obsažených v minerálních pigmentech a vypovídajících o původu díla.
- Studiu degradačních a alteračních procesů probíhajících v barevných vrstvách nástěnných maleb s cílem objasnit mechanismus procesů a navrhnout řešení, jak zastavit nebo zpomalit tyto procesy.

## Geochemická analýza sedimentů

Geochemická analýza je interdisciplinární věda kombinující poznatky a metody chemické analýzy, anorganické chemie, geochemie a geologie. Výzkum byl zaměřen na dvě hlavní oblasti, kterými jsou

- Geochemická analýza říčních sedimentů poskytující informaci o příčinách a vývoji znečištění říčních systémů včetně posouzení vlivu člověka v těchto procesech.

- Analýza sedimentů mostecké pánve slouží k rekonstrukci důsledků klimatických změn v mostecké pánvi v období miocénu. Poznání složení nadloží slouží společnosti Severočeské doly, a.s. k optimalizaci způsobu těžby s ohledem na tvrdost nadložních vrstev a k minimalizaci rizik sesuvů.

### **Aplikovaný výzkum**

Ve spolupráci s průmyslovými partnery probíhal vývoj v oblasti konstrukčních materiálů a speciálních boranů. Jedná se zejména o

- Fotokatalytické  $\text{SiO}_2\text{--TiO}_2$  kompozity a nanosoly ZnO se samočisticími vlastnostmi pro sanace povrchů budov kontaminovaných řasami nebo plísněmi.
- Materiály na bázi anorganických matic s absorbtory neutronů a gama záření pro opravy betonových prvků jaderných elektráren
- Ekologické betony pro opravy silnic studenou recyklační technologií *in situ*.
- Anorganické materiály pro 3D tisk

V souvislosti s ukončením Programu výzkumné činnosti 2012 - 2017 byla vypracován program výzkumné činnosti ústavu na léta 2018 - 2022 - Research Program of the Institute of Inorganic Chemistry of the Czech Academy of Sciences in 2018 - 2022. Program byl projednán a schválen Radou ústavu dne 1. 12. 2017.

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

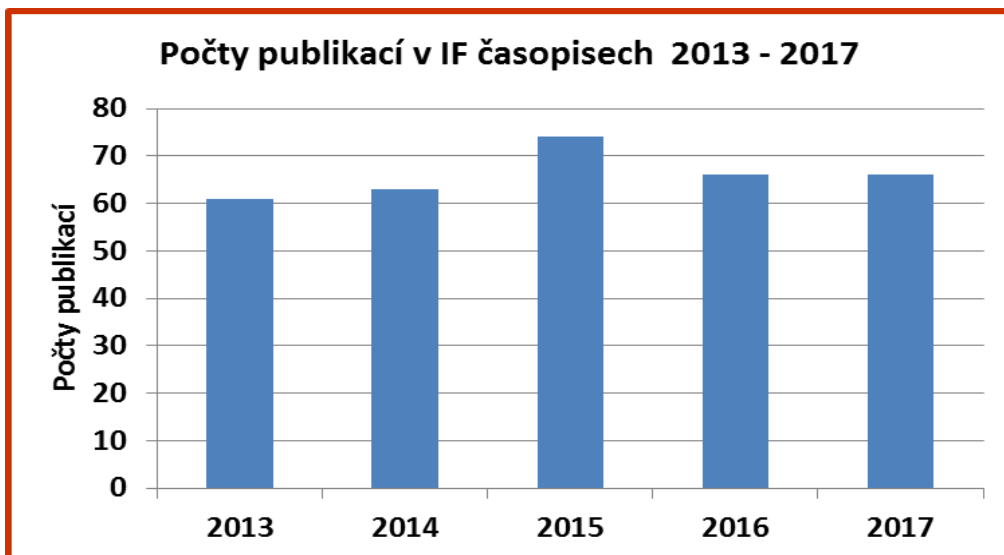
Nejvýznamnější výsledky byly v r. 2017 získány především v oblastech:

- materiálové chemie se zaměřením na vývoj materiálů a nanomateriálů s baktericidními a cytotoxickými vlastnostmi, nanoporézních materiálů s extrémně vysokou stabilitou pro separaci plynů a biologické aplikace, luminiscenčních a radioluminiscenčních molybdenových, rhéniových a měďných molekulárních klastrů pro biologické aplikace, nanostrukturních oxidů a jejich kompozitů pro fotofotokatalýzu, degradaci organofosfátových pesticidů a chemických bojových látek a pro ochranu zateplených fasád před plísněmi a řasami, přípravu tenkých vrstev hexagonálních feritů, přípravu a testování kompozitů pro stínění ionizujícího záření a anorganických materiálů pro 3D tisk.

- chemie nových karboranů, heteroboranů a jejich komplexů s přechodnými kovy: byla vyvinuta originální reakční schémata, optimalizována struktura inhibitorů karbonické anhydrázy CA-IX vykazující subnanomolární hodnoty  $K_i$  a vysokou selektivitu, byl nalezen termochromický fluorescenční boran a popsán kombinací experimentálních a teoretických metod, kvantově chemickými metodami byly popsány doposud neznámé slabé interakce v krystalových strukturách heteroboranů, byl prostudován vliv dipólu pro tvorbu samoskladných orientovaných vrstev substituovaných karboranů na površích kovů.



Získané výsledky byly v roce 2017 zveřejněny v 66 publikacích v mezinárodních časopisech, z převážné části v časopisech, jejichž kvalita odpovídá kvartilům Q1 resp. Q2 v oboru (dle JRC). Na následujícím obrázku je znázorněn vývoj publikační aktivity pracovníků ústavu v období 2013 – 2017 (zdroj Web of Knowledge).



V roce 2017 byla publikační aktivita srovnatelná s předchozími roky. Pracovníci ústavu byli korespondujícími autory více než poloviny publikací. Kvalita většiny prací zůstává vysoká.

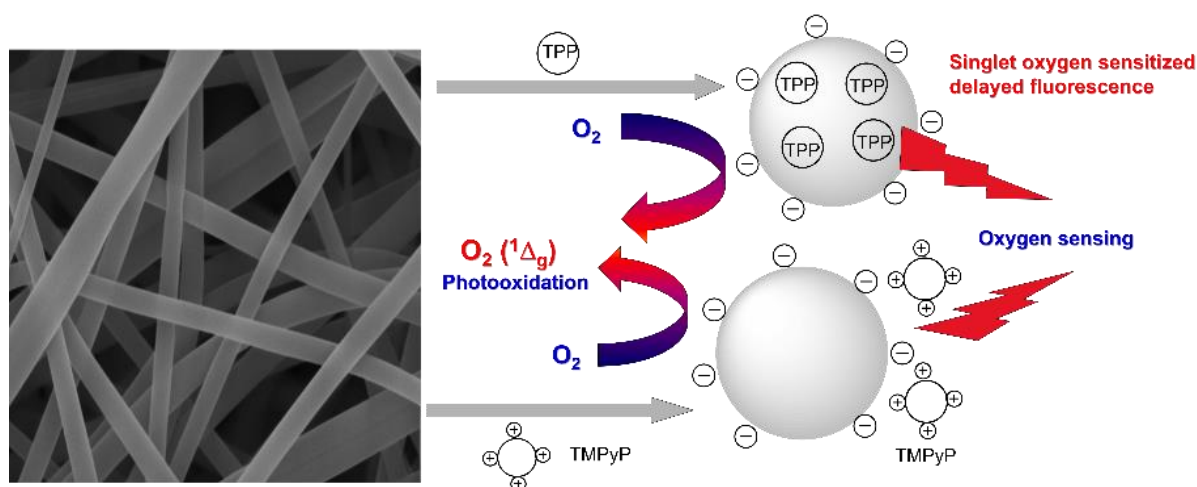
## Významné výsledky s uvedením citací:

### (1) Nanočástice pro fotooxidační reakce a kontinuální detekci kyslíku

Pracovníci Oddělení materiálové chemie připravili sulfonované polystyrenové nanočástice se zabudovanými či iontově vázanými porfyrinovými fotosensitizátory (PSs). Tyto PSs produkují excitovanou formu kyslíku po ozáření viditelným světlem, tzv. singletový kyslík. Singletový kyslík je reaktivní, cytotoxická molekula s krátkou dobou života. Výhodou těchto nanomateriálů je jejich duální funkce. Produkují singletový kyslík a současně fungují jako kyslíkový senzor umožňující stanovit aktuální koncentraci kyslíku, který je spotřebováván fotooxidačními reakcemi s okolními molekulami.

Funkce je založena na detailní analýze průběhu intenzity zpožděné fluorescence porfyrinového PSs, která je stimulována singletovým kyslíkem. Metoda umožňuje kontinuální měření koncentrace rozpuštěného kyslíku v široké oblasti koncentrací od anaerobních podmínek po kyslíkem nasycené roztoky a predikci fotooxidačních schopností fotoaktivních (nano)materiálů vůči chemickým resp. biologickým substrátům. Navíc, měření této stimulované fluorescence je velmi citlivou metodou detekce singletového kyslíku ve vodném prostředí, protože přímé měření luminiscence singletového kyslíku je limitováno velmi nízkou intenzitou.

Díky duálnímu charakteru a stabilitě ve vodném prostředí jsou tyto nanočástice perspektivními kandidáty pro biomedicínské aplikace.



### Schéma přípravy nanočástic a jejich aplikace

Schéma naznačuje přípravu sulfonovaných polystyrenových nanočástic se zabudovanými či iontově vázanými porfyrinovými fotosensitizátory z polystyrenových nanovláken a jejich využití pro fotogeneraci antimikrobiálního singletového kyslíku a pro detekci kyslíku pomocí singletovým kyslíkem sensitizované zpožděné fluorescence.

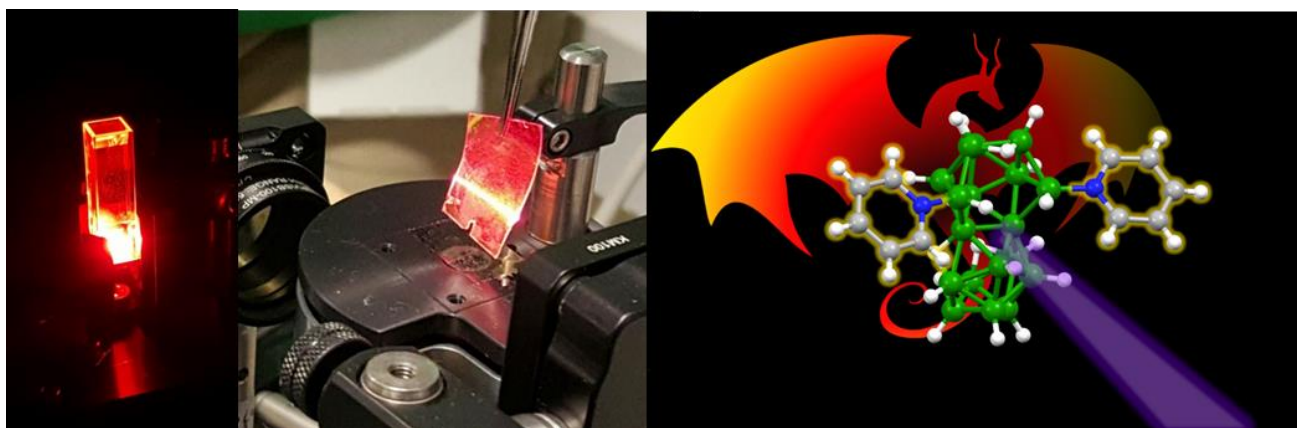
Kubát, P., Henke, P., Berzediová, V., Štěpánek, M., Lang, K., Mosinger, J.\* :  
Nanoparticles with Embedded Porphyrin Photosensitizers for Photooxidation Reactions and Continuous Oxygen Sensing. *ACS Applied Materials & Interfaces* **9** (2017), 36229-36238; JCR/Q1

Spolupráce: PŘF Univerzity Karlovy v Praze, ÚFCh J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.

## (2) Fluoreskující „dračí“ molekula aneb pozoruhodný termochromický fluorescenční boran

Nová chemická sloučenina,  $B_{18}H_{20}(NC_5H_5)_2$ , jejíž neobvyklá molekulární struktura připomíná letícího draka s tělem tvořeným klastrem hydridu boru a dvěma rozvinutými pyridinovými „křídly“, byla připravena na Oddělení syntéz. Molekula má zajímavé fotofyzikální vlastnosti. Při pokojové teplotě roztok sloučeniny fluoreskuje rudě (690 nm), zatímco sloučenina v pevné fázi emituje cihlově červené záření (620 nm) se zvýšenou intenzitou způsobenou omezením rotace „křidel“ - pyridinových ligandů. Ochlazení k 8 K způsobuje další posun vlnové délky záření, jehož barva se mění na zářivě žlutou (585 nm) a intenzita vzrůstá dvojnásobně. Při zakotvení v polystyrénovém filmu dochází k absorpci excitační energie při 414 nm a emisi fotostabilního jasně oranžového záření. Fluorescence z polystyrénového filmu obsahujícího  $B_{18}H_{20}(NC_5H_5)_2$  může být stimulována také emisí z dalšího fluorescenčního boranu, *anti*- $B_{18}H_{22}$ , mechanismem přenosu energie. Polystyrenové membrány dopované směsí *anti*- $B_{18}H_{22}$  a  $B_{18}H_{20}(NC_5H_5)_2$  v poměru 1:1 absorbují světlo v širokém rozsahu vlnových délek od 250 do 500 nm a emitují fluorescenční záření při 609 nm.

Tato schopnost může být využita při konstrukci luminiscenčních solárních koncentrátorů – zařízení, která dokáží shromáždit světelnou energii v širokém intervalu frekvencí a koncentrovat ji do emise záření o jediné vlnové délce.



### Luminiscence $B_{18}H_{20}(NC_5H_5)_2$

Emise  $B_{18}H_{20}(NC_5H_5)_2$  v pevné fázi (nalevo) a ve formě tenkého polystyrenového filmu (uprostřed). Molekulární struktura  $B_{18}H_{20}(NC_5H_5)_2$ , její boranové tělo a pyridinové křídla připomínají draka (vpravo). Molekula je aktivována fialovým světlem a vydává oranžovo-červené světlo.

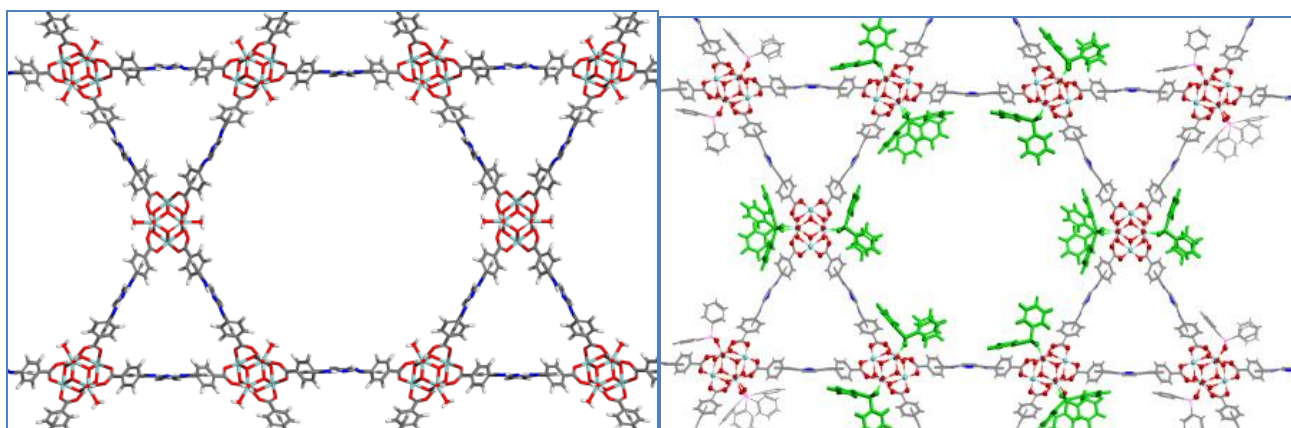
Londesborough, M. G. S. \*, Dolanský, J., Cerdán\*, L., Lang, K. \*, Jelínek, T., Oliva, J. M., Hnyk, D., Roca-SanJuan, D. \*, Frances-Monerris, A., Martinčík, J., Nikl, M., Kennedy, J. D.:

Thermochromic Fluorescence  $B_{18}H_{20}(NC_5H_5)_2$ : An Inorganic-Organic Luminiscent Compound with Unusual Molecular Geometry. *Advanced Optical Materials* 5 (2017), 1600694; JCR/Q1

Spolupráce: CSIC, Inst. Quim. Fis. Rocasolano, Madrid, Španělsko; University Complutense Madrid, Fac. Chem., Madrid, Španělsko; University of Valencia, Inst. Ciencia Mol., Valencia, Španělsko; University of Leeds, School of Chemistry, Leeds, VB; PŘF Univerzity Karlovy v Praze; FzÚ AV ČR, v. v. i.

### (3) Modifikace zirkoniových porézních materiálů vedoucí k vyšší stabilitě a photoaktivitě

Pracovníci Oddělení materiálové chemie vyvinuli novou metodu modifikace porézních koordinačních polymerů (MOFů) s využitím zakotvující skupiny založené na fosfínové kyselině ( $R_2POOH$ ). MOFy jsou krystalické materiály založené na kombinaci kovových klastrů s organickými spojovacími molekulami. Díky dané geometrii jednotlivých stavebních bloků vznikají porézní struktury s povrchem nad  $1000 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ . Široká škála možných kovů a spojovacích molekul dává nepřeborné kombinace, jejichž vlastnosti mohou být ‚ušity na míru‘ dané aplikaci. Avšak běžné MOFy mají nízkou stabilitu ve vodném prostředí nebo i v přítomnosti vzdušné vlhkosti. Oproti doposud používaným spojnicím s karboxylovými skupinami ( $HOO-R-COOH$ , kde R je aryl nebo alkyl), se fosfínové kyseliny vážou mnohem pevněji ke kovovým centrům. Zároveň tuto kostru nenarušují, tak jak jiné ligandy, např. obsahující fosfonové skupiny ( $RPO_3H_2$ ). Naše nová metoda umožňuje řídit hydrofilicitu/hydrofobicitu uvnitř pórů MOFů nebo zavádět další funkční skupiny na jejich kostru. Tato modifikace významně zvyšuje chemickou stabilitu MOFů a tak rozšiřuje jejich využitelnost pro praktické aplikace. Navíc, difenylfosfínovou kyselinou modifikovaný PCN-222/MOF-545 vykazuje po ozáření viditelným světlem čtyřikrát vyšší produkci singletového kyslíku než nemodifikovaný MOF. Vznik singletového kyslíku je významný pro využití MOFů s antibakteriálními a antivirovými vlastnostmi.



**Struktura MOFu před a po modifikaci**

Struktura výchozího MOFu (vlevo) a molekulovou dynamikou vypočítaná struktura MOFu modifikovaného pomocí kyseliny difenylfosfínové (vpravo).

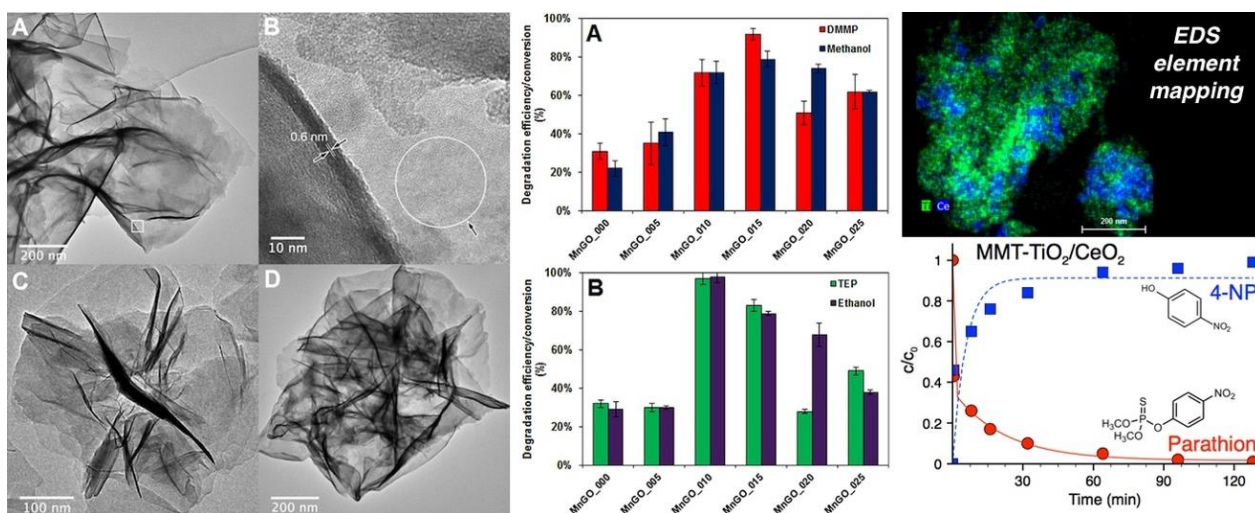
Hynek, J., Ondrušová, S., Bůžek, D., Kovář, P., Rathouský, J., Demel, J.:

Postsynthetic modification of a zirconium metal-organic framework at the secondary building unit with diphenylphosphonic acid for increased photosensitizing properties and stability. *Chem. Commun.* **53** (2017), 8557-8560; JCR/Q1

Spolupráce: MFF Univerzity Karlovy v Praze; ÚFCh J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.

#### (4) Nanokompozitní reaktivní adsorbenty k destrukci organofosforečnanových bojových chemických látek a pesticidů

Na Oddělení materiálové chemie jsme ve spolupráci s Univerzitou J.E. Purkyně v Ústí nad Labem vyvinuli nenáročnou srážecí metodu k přípravě práškových adsorbentů. U nanostrukturovaných oxidů kovů s vysokým měrným povrchem a vhodnými povrchovými vlastnostmi byla prokázána výborná účinnost rychlého navázání a chemické deaktivace nebezpečných organofosforečnanů, jako jsou nervově paralytické bojové chemické látky nebo pesticidy. Připravené materiály byly úspěšně testovány k destrukci látek, jakými jsou Soman, látka VX nebo yperit. Degradační vlastnosti jednosložkových oxidů (především  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{CeO}_2$ ,  $\text{MnO}_2$ ) lze významně ovlivnit nejen způsobem přípravy, ale i tvorbou vícesložkových systémů na bázi směsných a kompozitních oxidů (např. systém  $\text{TiO}_2$ - $\text{CeO}_2$ ). Objev grafenu a jiných nízkodimenzionálních systémů (také připravovaných na ÚACH) však přinesl zcela nové možnosti, jak s výhodou kombinovat nově objevené vlastnosti nízkodimenzionálních materiálů (např. sorpční schopnosti a enormní měrný povrch grafenu) právě s nanostrukturovanými oxidy. Navíc tzv. nízkoteplotní metody na vodní cestě vyvinuté na ÚACH jsou pro šetrnou a kontrolovanou přípravu nanokompozitů velmi vhodné. Lze tak očekávat, že u nových adsorbentů bude možné modifikovat jejich povrchové a strukturní vlastnosti podle cílového polutantu nebo hledat jejich nové aplikace.



TEM snímky kompozitu  $\text{MnO}_2/\text{GO}$ , degradační účinnost sorbentu pro vybrané organofosforečnany a EDS mapování prvků v kompozitu  $\text{TiO}_2/\text{CeO}_2$ -Montmorillonite

Henysh, J\*, Kormunda, M., Štastný, M., Janoš, P., Vomáčka, P., Matoušek, J., Štengl, V.: Water-based synthesis of  $\text{TiO}_2/\text{CeO}_2$  composites supported on plasma-treated Montmorillonite for parathion methyl degradation. *Applied Clay Science* (2017), 144, 26-35; JCR/Q1.

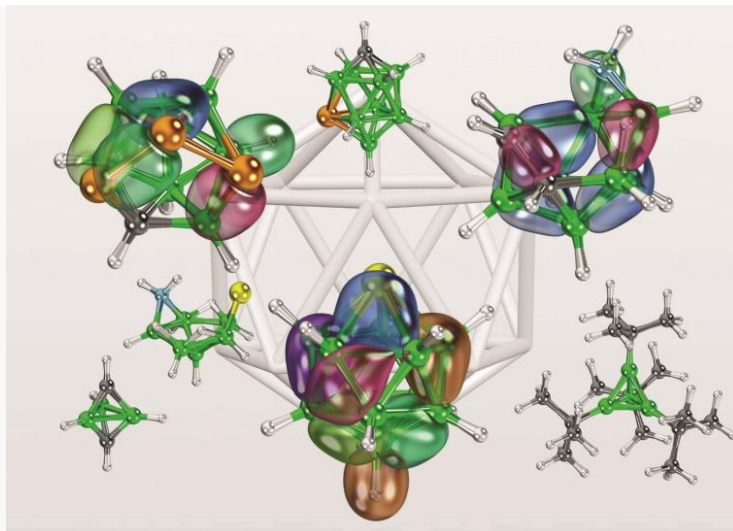
Štastný, M. \*, Tolasz, J., Štengl, V., Henysh, J., Žižka, D.: Graphene oxide/ $\text{MnO}_2$  nanocomposite as destructive adsorbent of nerve-agent simulants in aqueous media. *Applied Surface Science* (2017), 412, 19-28; JCR/Q1.

Janoš, P\*, Henysh, J., Pfeifer, J., Zemanová, N., Pilařová, V., Milde, D., Opletal, T., Tolasz, J., Malý, M., Štengl, V.: Nanocrystalline cerium oxide prepared from carbonate precursor and its ability to breakdown biologically relevant organophosphates. *Environmental Science-Nano* (2017), 4(6), 1283-1293; JCR/Q1.

Spolupráce: FŽP a PŘF Univerzity J.E. Purkyně v Ústí nad Labem, Vojenský výzkumný ústav Brno, s.p.

## (5) Příspěvek k poznání slabých interakcí v krystalových strukturách heteroboranů

Studium slabých interakcí patří v současnosti mezi aktuální témata moderní chemie, a to díky jejich důležité roli v živých a přírodních systémech. V souvislosti s nadějným potenciálem klastrových sloučenin boru pro využití v medicíně jsme se zaměřili na studium slabých interakcí v krystalových strukturách substituovaných i nesubstituovaných heteroboranů, tj. sloučenin, v jejichž 3D skeletu je jeden atom boru nahrazen atomem základních řad periodického systému. Pozorovaná přítomnost neobvyklé orientace molekul v krystalu byla vysvětlena právě na základě slabých interakcí, které jsou podmíněny přítomností tzv.  $\sigma$ - a  $\pi$ -děr. Ty reprezentují kladné části atomů zabalené do elektronových obalů a interagují se zápornými oblastmi dalších atomů v sousedních molekulách. Podklady pro toto vysvětlení byly získány metodami výpočetní chemie, pomocí nichž bylo zjištěno, že velikost  $\pi$ -děr je v přímém vztahu ke spektrům nukleární magnetické rezonance,  $^{11}\text{B}$  NMR. Důvody, které vedou k neočekávaným vazebným poměrům těchto sloučenin, byly vyšetřovány opět výpočetně, a sice novým nástrojem kvantové chemie, který poskytuje přímou souvislost mezi vazebnými poměry a některými chemickými jevy. U těchto sloučenin tak byly objeveny zcela nové vazebné vlastnosti.



**Grafické znázornění molekul, v jejichž krystalech byla zjištěna přítomnost slabých interakcí na obálce časopisu *Phys Chem Chem Phys* 20(2018)**

Melichar, P., Hnyk, D., Fanfrlík, J. \*: A systematic examination of classical and multi-center bonding in heteroborane clusters. *Physical Chemistry Chemical Physics* 20(2018) 4666-4675. JCR/Q1

Macháček, J., Bůhl, M., Fanfrlík, J., Hnyk, D. \*: Nuclear Magnetic Shielding of Monoboranes: Calculation and Assessment of B- $^{11}$  NMR Chemical Shifts in Planar  $\text{BX}_3$  and in Tetrahedral  $[\text{BX}_4]^{(-)}$  Systems. *Journal of Physical Chemistry A*, 121(2017), 9631-9637. JCR/Q2

Holub, J., Melichar, P., Ružičková, Z., Vrána, J., Wann, D.A., Fanfrlík, J. \*, Hnyk, D. \*, Ružička A. \*: A novel stibacarbaborane cluster with adjacent antimony atoms exhibiting unique pnictogen bond formation that dominates its crystal packing. *Dalton Transactions* 46(2017) 13714-13719. JCR/Q1

Fanfrlík, J., Pecina, A., Řezáč, J., Sedlák, R., Hnyk, D., Lepšík, M. \*, Hobza, P. \*: B-H center dot center dot center dot pi: a nonclassical hydrogen bond or dispersion contact? *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(2017) 18194-18200. JCR/Q1

Spolupráce: UOCHB AV ČR, v. v. i.; University of St. Andrews, School of Chemistry, UK; Univerzita Pardubice; Univerzita Palackého, Olomouc.

## (6) Amorfní metatitaničitany a peroxotitaničitany jako nanostrukturované sorbenty a prekuzory pro krystalický oxid titaničitý s požadovanou velikostí a tvarem částic

Byl vyvinut nový způsob přípravy mikrotyčinek metatitaničitanů, který vychází z krystalků pevného hydrátu titanylsulfátu s definovanou morfologií. Jednoduchá potenciálně průmyslově použitelná metoda probíhající ve vodném prostředí vychází z extrakce sulfátových iontů z krystalů a jejich nahrazení hydroxylovými skupinami za vzniku kyseliny metatitaničité nebo jejích solí, které zachovávají morfologii – tvar a rozměry částic výchozího krystalického materiálu a samy jsou krystalograficky amorfní. Tepelnou úpravou tohoto materiálu byly získány krystalické nanočástice anatasu, tyčinková morfologie zůstala i nadále zachována. Tato metoda byla použita pro syntézu mimořádně aktivních sorbentů schopných účinně a rychle sorbovat těžké kovy a radioizotopy ( $\text{Cs}^+$ ,  $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$  aj.) z vodného roztoku.

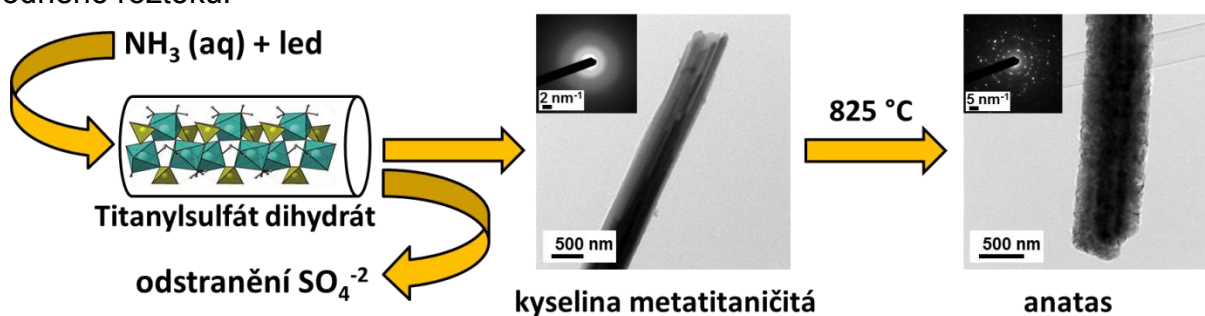
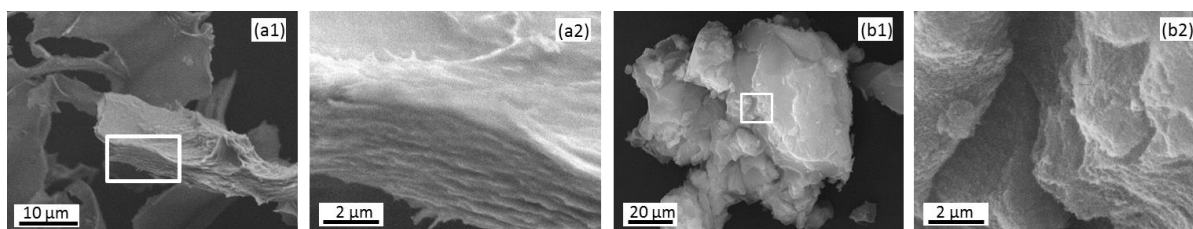


Schéma přípravy částic kyseliny metatitaničité a následně anatasu a jejich struktura

Modifikace výše popsané metody s použitím vodného roztoku peroxidu vodíku a 2 různých metod sušení – lyofilizace (vakuové vymrazování) či tzv. sušení pomocí kritického bodu  $\text{CO}_2$  vede k lístečkové 2D formě. Pomocí této metody byly připraveny vysoce aktivní fotokatalyzátory.



Lístečková morfologie materiálů připravených (a) lyofilizací a (b) sušením pomocí kritického bodu

Klementová, M., Motlochová, M.\*, Boháček, J., Kupčík, J., Palatinus, L., Pližingrová, E., Szatmáry, L., Šubrt, J.: Metatitanic acid pseudomorphs after titanyl sulfates: nanostructured sorbents and precursors for crystalline titania with desired particle size and shape. *Crystal Growth and Design* 17/12/ (2017), 6762-6769. JCR/Q2

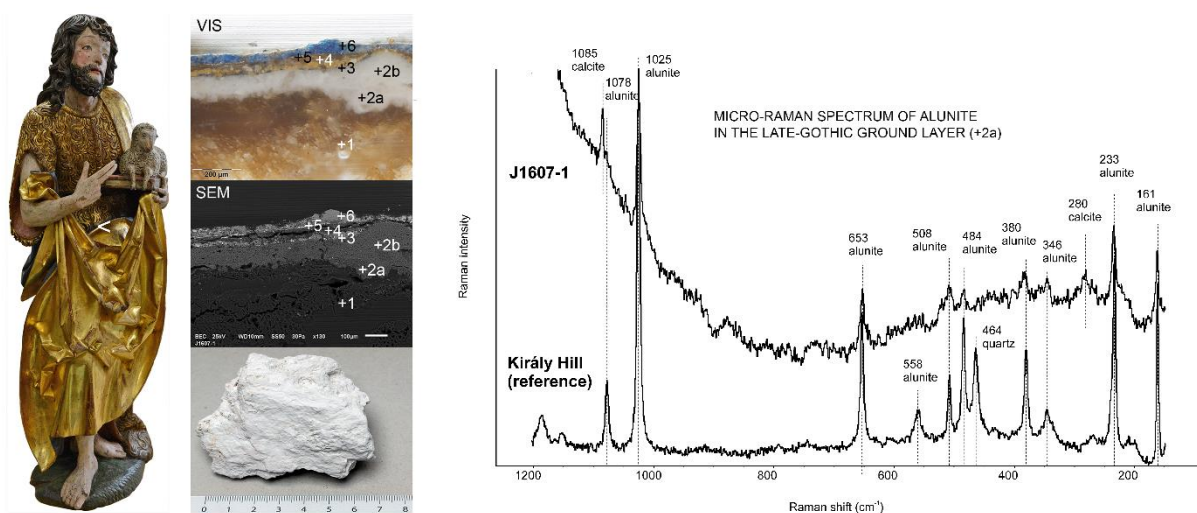
Pližingrová, E., Klementová, M., Bezdička, P., Boháček, J., Barbieriková, Z., Dvoranová, D., Mazúr, M., Krýsa, J., Šubrt, J.\*, Brezová, V.: 2D-Titanium dioxide nanosheets modified with Nd, Ag and Au: Preparation, characterization and photocatalytic activity, *Catalysis Today* 281 (2017), 165–180. JCR/Q2

Šubrt, J., Pližingrová, E.\*, Palkovská, M., Boháček, J., Klementová, M., Kupčík, J., Bezdička, P., Sovová, H.: Titania aerogels with tailored nano and microstructure: comparison of lyophilization and supercritical drying, *Pure and Applied Chemistry* 89/4/ (2017), 501-509. JCR/Q1

Spolupráce: FZÚ AV ČR, v.v.i.; ÚCHP AV ČR, v.v.i.; VŠCHT Praha, Ostravská univerzita, Ústav fyzikální chemie a chemické fyziky, Slovenská Technická Univerzita v Bratislavě.

## (7) Překvapivé materiálové zdroje pozdně-gotického malířství

Řada pojmů z historické výtvarné technologie je nekriticky přebírána. Například o tzv. arménském bolusu se dočteme, že se jednalo o červený mastný jíl z oblasti bývalé Arménie, který se používal jako podklad pod zlacení - poliment. Tendenčně je pak každý červený jílový poliment označován jako arménský bolus bez ohledu na fakt, že volbu materiálu často ovlivňovala jeho dostupnost a cena. Zjistili jsme například, že pozdně-gotické polimenty systematicky obsahují zvýšené podíly gibbsitu -  $\text{Al}(\text{OH})_3$  a boehmitu -  $\text{AlO}(\text{OH})$ , tedy minerálů obsažených nikoliv v červených jílech, ale spíše v bauxitech – pestrobarevných horninách zcela odlišného původu i provenience. Použití bauxitu v polimentech přitom dosud nikdo nepopsal. Pozdně-gotických umělců se ale týkají i technologické experimenty velmi lokálního charakteru. Doložili jsme, že významný sochař Majster Pavol z Levoče přimíchal do křídového podkladu svých polychromovaných plastik kaolin a důvodem byla opět levná dostupnost. Specifická příměs alunitu -  $\text{KAl}_3(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_6$  potvrzená v odebraných mikrovzorcích totiž souvisí s hydrotermálním původem kaolinu a tedy zdrojem suroviny v oblasti Tokajských vrchů. Levoča byla přitom s Tokajskou oblastí spojena díky obchodu s vínem; občané Levoče zde často vlastnili i vinice. Mohl tedy Majster Pavol spolu s vínem dovést i zajímavý bílý materiál, možná i zdarma dostupný a vyzkoušet ho jako alternativu k dražší a z daleka dovážené křídě? Tato historická souvislost se ve světle nových poznatků materiálového výzkumu jeví jako velmi pravděpodobná.



Identifikace alunitu metodou Ramanovy mikrospektroskopie (vpravo); jeho zastoupení v bílém podkladu (vrstvy 2a,b v mikrovzorcích vlevo) polychromovaných plastik Majstra Pavla z Levoče (zcela vlevo) dokládá, že zdrojovou oblastí použitého kaolinu byla oblast Tokajských vrchů

Hradil D.\*, Hradilová J., Bezdička P., Serendan C.: Late Gothic / Early Renaissance gilding technology and the traditional poliment material "Armenian bole": truly red clay, or rather bauxite? *Applied Clay Science* 135 (2017), 271-281; JCR/Q1

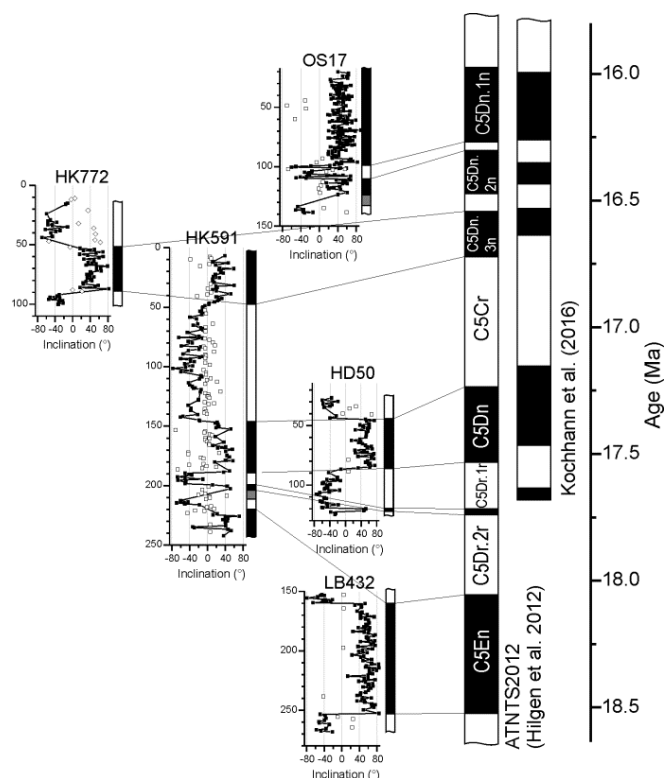
Hradil D.\*, Hradilová J., Bezdička P., Matulková I.: Kaolinite-alunite association in Late Gothic white grounds from Slovakia: a local peculiarity in painting technology. *Applied Clay Science* 177 (2017), 79-87; JCR/Q1

Spolupráce: Akademie výtvarných umění v Praze; PřF Univerzity Karlovy v Praze; National University of Arts, Bucharest, Rumunsko.



## (8) Nový způsob zpracování pevninských sedimentárních archívů: draslíková chemostratigrafie

Výsledkem skoro desetileté práce v mostecké pánvi a je podrobný popis stratigrafie sedimentů v nadloží hlavní uhelné sloje v mostecké (dříve zvané severočeské hnědouhelné) pánvi. Použili jsme nejmodernější dostupné metody chemostratigrafie, cyklostratigrafie a magnetostratigrafie. Nadložní vrstvy v mocnosti od asi padesátí do několika set metrů se vyskytují na ploše asi 10 x 40 km a představují nejpodrobnější známý pevninský sedimentární archív období asi dvou miliónů let před vrcholem miocenního klimatického optima (MCO). MCO bylo nejdramatičtější epizodou přechodného zmenšení antarktického ledovce na zlomek jeho původní velikosti za období několika desítek miliónů let. Oceánské sedimenty z té doby, konvenčně využívané jako klimatický archív, vykazují stopy po přerušení sedimentace (hiátů), takže některé detaily z vývoje klimatu před MCO jsou předmětem vědeckých diskusí, stejně tak jako jeho příčiny. Pokusili jsme se do těchto diskusí zasáhnout principiálně novým způsobem, a to sestavením sedimentárního archívu intenzity chemického zvětvávání pomocí normalizovaného obsahu draslíku, a to poměry koncentrací prvků K/Al nebo K/Ti. Domníváme se, že tento náš nový postup se v budoucnu zavede jako univerzální pro pevninské sedimentární záznamy.



### Magnetostatigraphická korelace a model stáří sedimentů mostecké pánve

Matys Grygar, T.\*; Mach, K.; Hošek, M.; Schnabl, P.; Martinez, M.; Koubová, M. Early stages of clastic deposition in the Most Basin (Ohře Rift, Czech Republic, Early Miocene): timing and possible controls. *Bulletin of Geosciences* 92(2017), 337-355; JCR/Q3

Matys Grygar, T.\*; Hošek, M.; Mach, K.; Schnabl, P.; Martinez, P. Climatic instability before the Miocene Climatic Optimum reflected in a Central European lacustrine record from the Most Basin in the Czech Republic. *Palaeogeography Palaeoclimatology Palaeoecology* 485(2017), 930-945; JCR/Q1

Spolupráce: Severočeské doly, a.s.; Geologický ústav AV ČR, MARUM, Brehmen, Německo

## (9) Nanosoly ZnO pro ochranu zateplených fasád

Nové fasády na bázi akrylátových matric, které se používají při rekonstrukcích a zateplování starších budov a panelových domů, trpí fatálním nedostatkem, kterým je jejich snadné napadení řasami a plísněmi na vlhčích nebo nedostatečně vysušených místech fasád. Pro jejich odstraňování se používají nejrůznější biocidní prostředky, jejichž účinnost je buď krátkodobá (dochází k postupnému vymývání účinných biocidních látek) nebo nízká (nedostatečná koncentrace účinných látek).

V rámci základního výzkumu na Oddělení materiálové chemie jsme během přípravy tenkých vrstev na bázi nanosolů ZnO zjistili, že tyto tenké vrstvy ZnO mohou účinně přispět k řešení tohoto palčivého problému. Takto vyvinuté prostředky pro úpravy fasád jsme patentovali. Tenké vrstvy z těchto solů, nanesené na fasády, se ukazují jako vhodné a vysoce účinné řešení pro zabránění růstu řas a plísní.

Ve spolupráci s firmou Malpex s.r.o. byla vyvinuta technologie přípravy těchto prostředků v rozšířeném laboratorním měřítku a produkty byly ověřeny v praxi.

V současné době probíhá certifikace prostředku pro jeho čtvrtprovozní výrobu a připravují se rozsáhlé zkušební testy v praxi.



### Ošetřená vs. neošetřená fasáda Ústavu

Snímek se skenovacího elektronového mikroskopu, který ukazuje, že nanosení nanosolu na bázi ZnO vytváří tenké homogenní vrstvy na zateplených fasádách domů (nalevo). Na nanosené vrstvě nanosolu nedochází ani po několika letech k růstu řas ani plísní – světlé pruhy na fasádě Ústavu byly ošetřeny nanosolem, neošetřená místa jsou pokrytá řasami.

Patent 304 031: Způsob přípravy nanosolu hydratovaného - ZnO, nanosol připravený tímto způsobem a použití tohoto nanosolu (PV 2011-880).

Spolupráce: firma Malpex, s.r.o.

## **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. 2017 podíleli na zajištění přednášek, seminářů a vedení prací v pregraduálních programech 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 2016/2017 a zimního semestru 2017/2018 přednášeli pracovníci ústavu v uvedených programech více než 700 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 Chemie a chemické technologie

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), Chemie (PřF Ostravská univerzita) a Aplikace přírodních věd (Budapesti Műszaki és).

V r. 2017 pracovalo pod supervizí ústavních školitelů 19 studentů DSP. Na řešení výzkumných projektů se účastnilo 13 pregraduálních studentů.

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

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

3a-1) Kompozitní nanomateriály na bázi grafenu s jedinečnými vlastnostmi pro environmetální aplikace

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

Poskytovatel: TA ČR (projekt TA04020222, program ALFA)

Dosažený výsledek: Projekt byl zaměřen na vývoj nového, vysoce sofistikovaného kompozitního materiálu určeného pro sorpci a záchyt radionuklidů na bázi grafenu, resp. grafen-oxidu s organickými polymery. Výsledkem řešení jsou čtvrtprovozní vzorky sorbentů a technologie výroby sorbentů, ověřená pro nejúčinnější z nich v poloprovozním měřítku.

3a-2) Technologie klastrových boratových aniontů pro nové materiály a aplikace v medicíně a elektrotechnice

Partner: Katchem, s. r. o.

Poskytovatel: TA ČR (projekt TH01020844); program EPSILON

Byly dopracovány postupy pro izolaci nesolvatovaných lithných, sodných, vápenatých a hořečnatých solí klastrových borátových aniontů. Byly ověřeny postupy pro zvyšování měřítka reakcí a ověřena technologie pro přípravu sodné soli dodekaborátového aniontu ve čtvrtprovozním měřítku. Dále byl dopracován vývoj „hybridních“ kloso-borátových aniontů, které mají povrch molekuly substituovaný halogenem a vazebné místo pro připojení k funkčním molekulám. Byly nalezeny postupy substituce těchto aniontů jednoduchými organickými skupinami. Tyto anionty mohou proto sloužit jako objemné a velmi stálé strukturní bloky pro racionální vývoj léčiv a pokročilé materiály.

3a-3) Boranové klastry pro nanostrukturovaná rozhraní materiálů v elektronických aplikacích

Partneři: Katchem s.r.o., Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i

Poskytovatel: TA ČR (projekt TH02020628, program EPSILON)

Dosažený výsledek: V rámci výzkumu byla testována interakce karboranových derivátů nesoucích různé funkční skupiny s povrchem křemíku. Výsledkem testování bylo vyřešení stabilního ukotvení molekul s velkým inherentním dipól momentem na H-terminovaném křemíku.

3a-4) Transparentní nanohybridní systémy s mimořádnou odolností proti UV záření a extrémním teplotám

Partner: TOSEDA s.r.o

Poskytovatel: MPO (projekt FV10480, program TRIO)

Dosažený výsledek: V prvním roce řešení byla provedena rešerše přípravy kvantových teček a grafen oxidu, tak aby byl příští rok dodán grafen oxid a připraveny kvantové tečky s vysokou adsorpcí v UV oblasti.

3a-5) Polymerní kompozitní vrstvy s grafenovými kvantovými tečkami

Partner: ROKOSPOL, a.s.

Poskytovatel: MPO (projekt FV10027, program TRIO)

Dosažený výsledek: V prvním roce řešení byly připraveny uhlíkové, grafen oxidové, WS<sub>2</sub>, MoS<sub>2</sub> a BCN kvantové tečky adsorbující intenzivně UV záření pro následnou aplikaci do polymerních vrstev. Uplatnění těchto pokročilých materiálů se předpokládá v oboru nanotechnologií a nanomateriálů.

3a-6) Inovativní fotokatalytické stěrky a přísady do betonu

Partneři: Betosan, ÚFCHE AV ČR, v.v.i., Technická univerzita Liberec

Poskytovatel: MPO (projekt FV20234, program TRIO)

Dosažený výsledek: Byl vyvinut postup fotokatalytické úpravy dvou typů křemenného písku pomocí kompozitu na bázi SiO<sub>2</sub> – TiO<sub>2</sub>, stanovená fotokatalytická aktivita produktů a pomocí elektronové mikroskopie byla charakterizována struktura fotokatalytické vrstvy a pokrytí povrchu písku. V následujícím období bude prvním typem produktu fotokatalyticky aktivní stěrka na cementové bázi pro aplikaci zejména na betonové podklady. Druhým typem produktu bude fotokatalyticky aktivní přísada do betonu v práškové formě, která umožní přípravu betonových povrchů s fotokatalytickou funkcí.

3-7) Nové kompozitní nanomateriály na bázi recyklovatelného tuhého odpadu

Partner: ÚJV Řež, a.s.

Poskytovatel: TA ČR (projekt TH02020110, program EPSILON)

Dosažený výsledek: Byl vyvinut postup syntézy metatitaničitanů alkalických kovů a  $\text{NH}_4^+$  z výchozí suroviny hydratovaného síranu titanylu. Takto připravené produkty jsou krystalograficky amorfní, vysoce porézní a s vysokou plochou povrchu. Některé vykazaly vysokou sorpční schopnost jak pro radionuklidy, tak i pro některé těžké kovy ( $\text{Pb}^{2+}$ ). Dále byl vyvinut postup přípravy směsných sorbentů na bázi metatitaničitanů kombinovaných s různými uhlíkatými sorbenty a stanovena jejich sorpční schopnost pro vybrané radionuklidy. Materiály jsou vyvíjeny jako sorbenty pro čištění případných odpadů z jaderných zařízení a odstraňování těžkých kovů z životního prostředí.

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

V r. 2017 byly uzavřeny hospodářské smlouvy s 26 odběrateli a byly řešeny 4 projekty smluvního výzkumu.

Nejvýznamnější výsledky:

Výsledek 1: Analýza stability betonů z konstrukcí jaderných reaktorů

Zadavatel: ČVUT – fakulta stavební, Experis DKSM, s.r.o.

Anotace: Byly analyzovány vzorky betonů pocházejících z českých jaderných elektráren pomocí rentgenové práškové difrakce, termické analýzy a rentgenové fluorescenční analýzy pro komplexní posouzení změn mineralogického složení, které probíhají při expozici betonů normálnímu prostředí a zvětrávání.

Uplatnění: Sledování dlouhodobé stability a případné koroze vybraných míst na betonových konstrukcích JE.

Výsledek 2: Nové anorganické materiály pro stínění pronikavé radiace

Zadavatel: PRAGO – ANORG, s.r.o.

Anotace: Byla připravena a nová generace původních bezpečných a nehořlavých anorganických materiálů s vysokými obsahy absorbátorů neutronů v kombinaci s prvky pro stínění gama záření.

Uplatnění: Stabilní stínicí materiál pro neutronové a gama záření.

Výsledek 3: Provozní test geopolymerních materiálů pro opravy vozovek technologií studené recyklace na místě

Zadavatel: ČLUZ a.s., ČNES a.s.

Anotace: Byl vybudován provozní experimentální úsek silnice na trenažéru společnosti ČNES a.s. v lokalitě Kladno Dřívň

Uplatnění: Dopravní průmysl

Výsledek 4: Vývoj, charakterizace a výroba nového biocidního prostředku na bázi Zn v rozšířeném laboratorním měřítku

Zadavatel: Malpex spol.r.o.

**Anotace:** Byly připraveny rozšířené laboratorní šarže nového biocidního prostředku na bázi Zn pro jeho certifikaci

**Uplatnění:** Průmysl nátěrových hmot

**Výsledek 5:** Mikroskopická charakterizace povrchu korodované nerezové oceli

**Zadavatel:** ÚJV Řež, a.s.

**Anotace:** Byla charakterizována morfologie povrchů a chemické složení případných korozních vrstev vzniklých na povrchu Fe-Cr-Ni nerezových ocelí používaných pro konstrukci jaderných reaktorů řízeným působením různých korozních činidel.

**Uplatnění:** Popis stárnutí ocelových částí jaderných reaktorů

### **3c) Patenty, užité vzory, vynálezy**

3c-1) Pojivo na bázi hydratovaných oxidů hořečnatých

**Kategorie:** patent, zapsán pod číslem 305801

Patent chrání způsob přípravy původních vysoce ekologických materiálů, které mohou v jednoduchých aplikacích nahradit betony na bázi portlandských cementů, jejichž výroba se řadí mezi nejvýznamnější technologie produkující skleníkové plyny.

3c-2) Closo-Dekahydrodekaborát obecného vzorce  $(Cat^+)_2[^{10}B_{10}H_{10}]^{2-}$  v  $^{10}B$  izotopicky čisté formě

**Kategorie:** užité vzor, zapsán pod číslem 30629

Předložené technické řešení se týká izolace solí closo-dekahydrodekaborátového aniontu obecného vzorce  $M_2[^{10}B_{10}H_{10}]^{2-}$  v izotopicky čisté formě, z odpadní směsi aniontů, které vznikají při výrobě nido-dekaboranu(14) a karboranu. Soli lze dále využít jako výchozí surovinu pro další sloučeniny se skeletem obohaceným isotopem  $^{10}B$  pro využití v Borové neutronové záchytové terapii nádorů (BNCT), detektory neutronového záření v kosmickém a v jaderném průmyslu.

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

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

4a-1) GEN IV Integrated Oxide Fuels Recycling Strategies (GENIORS, H2020 Euratom Research and Innovation Programme, 24 spoluřešitelů, 10 účastnických států)

Projekt je zaměřen na separaci aktinoidů z jaderných odpadů na základě postupů, navržených a schválených pro vývoj technologického procesu. ÚACH se účastní provádění a vyhodnocování testů radiální stability selektivních organických ligandů. Provádí analýzy vzorků po jejich vystavení ionizujícímu záření a izolaci a charakterizaci degradačních produktů z jejich směsí.

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) 6. mezioborová konference ALMA „Malířské dílo jako příběh“

1. – 3. 6. 2017; Augustiniánské opatství Brno, Mendelovo náměstí

Pořadatelé: Akademie výtvarných umění v Praze a Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i.; Spolupořadatelé: Masarykova univerzita, Moravská galerie v Brně, Česká a slovenská krystalografická asociace, Slovenská technická univerzita v Bratislavě, Vysoká škola výtvarných umění v Bratislavě

Počet účastníků: celkem 113, z toho ze zahraničí 65.

Významná prezentace: Koen Janssens / University of Antwerp, Belgie: Micro and macro scale chemical imaging on Van Eyck's Ghent Altarpiece (1432)

4b-2) 2. workshop Komise pro krystalografii v umění a kulturním dědictví (CrysAC workshop) s názvem „Aplikovaná krystalografie při studiu degradací pigmentů“

31. 5. 2017; Augustiniánské opatství Brno, Mendelovo náměstí

Pořadatelé: Akademie výtvarných umění v Praze a Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i.

Spolupořadatelé: Komise pro krystalografii v umění a kulturním dědictví (Mezinárodní krystalografická unie)

Počet účastníků: celkem 113, z toho ze zahraničí 65.

Významná prezentace: Costanza Miliani / CNR-ISTM and Centre SMAArt at University of Perugia, Itálie: Multi-scale study of the degradation of chrome yellow in oil paintings.

#### **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: Nové anorganické materiály pro 3D tisk; partner Bern University of Applied Sciences, Švýcarsko

4c-4) Téma: Využití monomolekulárních vrstev na površích pokovených textilií; partner Albstadt-Sigmaringen University, Department of Engineering, Textile Product Technology, Německo

4c-5) 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-6) Téma: Chemické výpočty karboranových klastrů, studium jejich interakcí s biomolekulami pomocí výpočtů a hmotnostní spektrometrie; partner Institute of Chemical Physics, CSIC, Madrid, Španělsko

4c-7) Téma: Fyzikálně-chemické studium chování iontových karboranů; partner Jacobs University Bremen, Německo.

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

Universita Bielefeld (chemické výpočty karboranových klastrů, stanovení struktur karboranů pomocí elektronové difrakce);

Inst. Química-Física "Rocasolano", CSIC, Madrid, Španělsko (borany pro laserové technologie));

Institute of Medicinal Biology, PAN, Polsko (syntéza modifikovaných karboranových a metallakarboranových klastrů pro využití pro borovou neutronovou terapii)

#### **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. 2017 uzavřeny smlouvy o dílo v hodnotě 1 499 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. 2017 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. 2017 s vyrovnaným rozpočtem.

Výše institucionální neinvestiční dotace poskytnuté z rozhodnutí zřizovatele v r. 2017 byla přibližně o 7 % vyšší než v r. 2016. Vedle institucionální dotace byla v r. 2017 část rozpočtu ústavu (cca 40 % neinvestičních nákladů) tvořena účelovými prostředky (7. RP, SPS NATO, MŠMT, MPO, GA ČR, TA ČR).

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 (1499 tis. Kč, viz výše) byl v r. 2017 v rámci hlavní činnosti realizován smluvní výzkum ve výši 1135 tis. Kč. Výnosy z uzavřených licenčních smluv činily 25 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, 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.

Hlavní směry výzkumu v roce 2018 vycházejí ze záměrů a výsledků národních a mezinárodních projektů z předchozích let, které mají přesah do roku 2018 a dále.

Hlavní linie v oblasti fotoaktivních molekul a materiálů bude spočívat v designu, přípravě, charakterizaci a ladění fyzikálně chemických, fotofyzikálních a fotochemických vlastností nových biomateriálů. Tyto biomateriály obsahují oktaedrické molybdenové klastry. Budeme však také studovat vlastnosti obdobných wolframových, rheniových, selenových a telurových klastrů. Tyto klastry jsou účinnými fotosenzitizátory singletového kyslíku a budou studovány pro aplikace ve fotodynamické terapii rakoviny (PDT). Mohou být také excitovány rentgenovým zářením, a proto budou klastry využity jako molekulární radiosenzitizátory pro cílené zaměření do buněk nebo budou zabudovány do nanočástic z důvodu eliminace jejich toxicity, stabilizace fotofyzikálních vlastností a zacílení na rakovinové buňky. Tento plán vyžaduje nejenom je syntetizovat a vyladit jejich vlastnosti, ale také pochopit jejich stabilitu, (foto)toxicitu a *in vitro* aktivitu. Předpokládáme, že tyto biomateriály umožní snížení

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

radiačních dávek potřebných pro odstranění tumorových buněk během radioterapie. Proto budou testovány *in vitro*.

Dále budeme studovat anorganické/organické polymerní materiály s nanostrukturovanými povrchy (nanovláčkové membrány, polymerní filmy, kovalentně vázané sítě, nanočástice) a mesoporézní SiO<sub>2</sub> nanočástice, které mají světlem řízenou funkcionalitou pro inaktivaci patogenů a senzorové aplikace. Tyto materiály budou vyvíjeny pro antibakteriální a antivirové aplikace. Pozornost bude rovněž věnována syntéze a strukturní charakterizaci nových derivátů makropolyhedrálních boranových klastrů a jejich interakci se světlem, zejména fluorescenčním vlastnostem, dvoufotonovým excitacím, excitovaným stavům a generaci singletového kyslíku.

Aktivita v oblasti základního výzkumu sloučenin boru bude nadále zaměřena na vývoj nových typů (poly)substituce na strukturně odlišných borátových aniontech a karboranových klastrech a pochopení její stereochemie a vnesených fyzikálně-chemických vlastností. Aktivity budou dále směřovány k pokračování ve vývoji metalakarboranových sendvičových strukturních bloků, které lze využít jako stavební jednotky v nanochemii a farmakologii. Budou prováděny strukturní studie známých i nových typů látek založené na kvantově-chemických výpočtech a difrakčních metodách. Nově se zaměříme na studium polycyklických hellicenových struktur, které obsahují křemík a bór.

V oblasti potenciálních aplikací boranových sloučenin bude pokračovat vývoj syntézy biologicky aktivních klastrových sloučenin bóru se zaměřením na konkrétní terapeuticky významné cíle. Pozornost bude směřována především na nízkomolekulární deriváty (kar)boranu, vhodné pro transport přes gastrointestinální a hematoencefalickou bariéru, tj. na látky s nadějným potenciálem pro vývoj léčiv proti multiresistentním a/nebo mozkovým nádorům. Pracovníci se budou dále podílet na experimentálním a teoretickém studiu způsobu vazby klastrových sloučenin bóru do molekul terapeuticky významných enzymů, V tomto směru bude pokračovat studium inhibitorů se specifickým účinkem vůči několika isoformám enzymu Carbonická Anhydráza. Budou sledovány interakce 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 zaměřených na modifikaci a ochrany kovových povrchů. Budou studovány interakce nových funkčních thiolových a karboxylových 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.

V oblasti orientované na nové materiály pro udržitelné životní prostředí budeme rozvíjet zavedenou problematiku reaktivních sorbentů a fotokatalyzátorů. Reaktivní sorbenty a fotokatalyzátory na bázi vícesložkových oxidů kovů a jejich kombinaci s grafenoxidem (především TiO<sub>2</sub>-grafenoxid), vyvinuté na ÚACH v posledních letech, velmi účinně degradují organofosforečné bojové chemické látky a pesticidy. Otvírají tak cestu pro vývoj zcela nových nanokompozitů. Zaměříme se na využití nízkodimenzionálních systémů (grafen, jeho analogy, aj.), jejichž unikátní ultrazvuková „top-down“ příprava je na ÚACH již zavedena. Nově objevené a překvapující fyzikálně-chemické vlastnosti těchto materiálů využijeme k tvorbě nanokompozitů se specifickými vlastnostmi a vysokou účinností pro cílenou destrukci vybraných bojových látek a environmentálních polutantů. Pečlivě designované složení nanokompozitů umožní jejich použití v různých prostředích (např. vodné i nevodné medium), ale i možnost nalézt jejich nové aplikace. Nedílnou součástí

bude detailní studium degradačních procesů pomocí již zavedených chromatografických metod (HPLC i GC) v reakčním mediu, ale nově také pomocí in situ infračervené spektroskopie, umožňující sledovat (foto)degradační procesy přímo na povrchu studovaného materiálu. Degradaci schopnosti perspektivních materiálů budou detailněji studovány na modelových látkách ve spolupráci s kolegy ze švédské univerzity v Uppsale a na reálných bojových chemických látkách ve Vojenském výzkumném ústavu Brno, s.p. Zaměříme se také na studium environmentálních dopadů a toxikologických vlastností těchto materiálů a možnosti zvyšování měřítka jejich přípravy a usnadnit tak jejich reálnou aplikaci ve spolupráci s potencionálními průmyslovými partnery.

Budeme vyvíjet nový typ organokovové sítě (MOF) složený z  $\text{Fe}^{3+}$  a spojovacích molekul obsahující skupiny fosfínových kyselin. U této skupiny MOFů budeme studovat vznik různých struktur, které lze připravit pomocí di-, tri- a tetra-vazných spojovacích molekul a jiných  $\text{M}^{3+}$  a  $\text{M}^{4+}$  kovů. Chceme prozkoumat aplikační potenciál MOFů založených na fosfínových kyselinách, především pro separaci  $\text{CO}_2$  a  $\text{N}_2$ , luminiscenční senzory a protonové vodiče. Věříme, že zvýšená hydrotermální stabilita a možnost jemného ladění velikosti a chemického charakteru pórů umožní navrhnout strukturu MOFu pro žádané aplikace. Dále budeme řešit přípravu kompozitů složených z MOFů a polymerů, které jsou zabudovány uvnitř pórů MOFů, a optimalizovat strukturu a složení MOFů pro separace plynů. Budeme také studovat katalytickou aktivitu zirkoniových MOFů pro degradace toxických organofosfátových sloučenin jako pesticidů nebo chemických bojových látek. Chceme stanovit, jak jejich katalytická aktivita závisí na pH vodných roztoků a použité metodě přípravy MOFu a definovat tak oblasti stability MOFů, o kterých se doposud předpokládalo, že jsou extrémně stabilní. Naše předběžná měření ukazují, že tomu tak není. Chceme také ukázat na environmentální rizika použití MOFů.

Metodami „soft chemie“ budeme připravovat nanokompozitní materiály na bázi oxidů železa a studovat příčné termoelektrické jevy. Nanokompozitní materiály budou také připraveny metodou micelárních filmů (např. magnetický spinel-piezoelektrický perovskit) s cílem studovat možnosti jejich magnetické a elektrické polarizace. Budeme pokračovat ve studiu magnetických a strukturních vlastností orientovaných vrstev hexagonálních feritů, potencionálně vykazujících magnetoelektrický jev v blízkosti pokojové teploty.

V rámci aplikovaného výzkumu budou vyvíjeny pokročilé anorganické materiály pro stínění ionizačního záření, nízkoalkalické a speciální betony na bázi původních anorganických matric, anorganické pultruzní a kompozitní systémy včetně prostředků pro opravy betonů v jaderném průmyslu.

V oboru environmentální geochemie budou pokračovat výzkumné aktivity zaměřené na poznání vztahů mezi znečištěním říčních systémů a architektury říčních niv. Další práce se bude zaměřovat na přímé hrozby spojené s ohnisky znečištění v nivách (remobilizace, vstup do potravního řetězce) a magnetickým znečištěním niv s využitím pokročilých statistických nástrojů na zpracování geochemických dat. Bude pokračovat rekonstrukce nástupu miocenního klimatického optima v mostecké pánvi. Připravujeme popis nových metod vyhodnocování změn prvkového složení, který by měl poskytnout nástroje široce využitelné ve výzkumu sedimentárních archívů.

V rámci studia kulturního dědictví bude pokračovat zejména experimentální výzkum mapující podmínky a iniciální stádia vzniku kovových mýdel v malbách jako důsledek interakce některých pigmentů a pojiv. Mechanismus saponifikačních procesů v různých systémech nebyl dosud uspokojivě popsán, přestože růst a agregace krystalů karboxylátů fatálně narušují mechanickou soudržnost malířských vrstev. Cílem pokračujících

provenienčních studií bude nalezení zdrojů jílových materiálů používaných v podkladových vrstvách italských barokních obrazů – zkoumána bude v tomto ohledu zejména možnost využívání hrnčířských hlín, a to v rámci komparativního studia italských terakotových plastik. Tento výzkum má zásadní význam pro posouzení technologických transferů v kontextu technické historie umění. Dále bude zahájen výzkum miniaturních portrétů z období 18. a 19. století se zapojením zcela nových neinvazivních analytických postupů. Tyto miniaturní portréty budou přírodovědeckými metodami studovány vůbec poprvé.

V r. 2017 byly 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 června 2017 jsme se stali členy konsorcia nově vytvořeného projektu GENIORS (EURATOM, Horizon 2020), jehož cílem je prohloubení znalosti o separaci minoritních aktinoidů za použití řady vybraných činidel, pochopení chování ligandů, komplexů a rozpouštědel přítomných v systému a hlediska spojená vývojem procesu a jeho bezpečností. Úkolem našeho týmu je detailní analýza, izolace a charakterizace degradačních produktů, které vznikají působením ionizujícího záření na selektivní extrakční činidla, a to za použití chromatografických separačních metod kombinovaných s hmotnostní spektrometrií a metodami NMR spektroskopie.

Naše pracoviště je zapojeno do široké mezinárodní spolupráce zaměřené na řešení 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. Podílíme se rovněž na charakterizaci produktů elektrolyzy fluoridových tavenin; který souvisí s konstrukcí budoucích tzv. „green“ jaderných reaktorů.

Pracovníci ústavu se podílejí na výzkumu nanostrukturních oxidů a chalkogenidů s fotokatalytickým účinkem, které za účasti slunečního záření aktivně rozkládají polutanty a redukuje nežádoucí výskyt řas a plísní. V rámci mezinárodního projektu COUNTERFOG (7.RP) jsme se účastnili vývoje dekontaminačního zařízení pro řešení krizových událostí. Projekt SPS NATO byl 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). Podílíme se rovněž na dalším vývoji a optimalizaci vlastností kompozitního fotokatalytického materiálu na bázi  $\text{SiO}_2 - \text{TiO}_2$ , který pod názvem Balclean zařadila do vyráběného sortimentu firma BARVY A LAKY TELURIA, Letovice. Materiál je v současné době používán pro zamezení růstu řas a samočisticí úpravu povrchu zateplených panelových domů.

V rámci základního výzkumu na Oddělení materiálové chemie jsme během přípravy tenkých vrstev na bázi nanosolů ZnO zjistili, že tyto tenké vrstvy ZnO mohou účinně přispět

k řešení palčivého problému napadení fasád řasami a plísněmi na vlhčích nebo nedostatečně vysušených místech. Tenké vrstvy z těchto solí, nanesené na fasády, se ukazují jako vhodné a vysoce účinné řešení pro zabránění růstu řas a plísní. V roce 2018 připravujeme čtvrtprovozní měřítko pro přípravu tohoto prostředku na ochranu zateplených fasád a budou provedeny rozsáhlejší ověřovací testy.

Další aktivity využitelné v oblasti ochrany životního prostředí:

V oboru environmentální geochemie bylo uzavřeno řešení projektu GAČR na téma vztahu mezi znečištěním říčních systémů a architektury říčních niv. Byla popsána ohniska (*hotspots*) U v nivě Ploučnice, Cd a Pb v nivě Litavky, Hg v nivách Ohře a na dolním toku Reslavy a Pb na středním toku Ohře. Ohniska znečištění se vyskytují vesměs v bývalých korytech v nivě nebo v korytovém pásu, většinou ve velice malých prostorově jasně vymezených sedimentárních tělesech. Ověřili jsme, že k jejich přesné lokalizaci lze využít metod geografických informačních systémů v kombinaci s terénními analýzami přenosných rtg fluorescenčním spektrometrem s využitím znalostí o vývoji říčních systémů (geomorfologie a sedimentologie). Současné monitorování historických zátěží v rezortu ministerstva životního prostředí tato ohniska znečištění nesleduje a neeviduje.

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. 2017 bylo v ústavu zaměstnáno 89 fyzických osob (FO).

### Struktura zaměstnanců ústavu

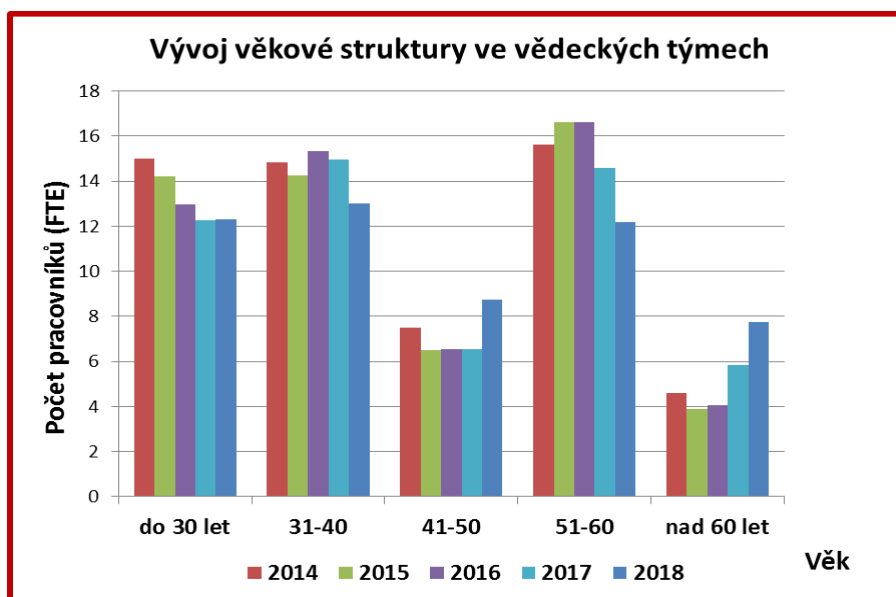
Počet zaměstnanců (přepočtený počet na celý úvazek)		celkem	z toho muži	z toho ženy
		69,4		
v tom	výzkumní pracovníci	57,6	35,9	21,7
	administrativní pracovníci	9,9	1	8,9
	techničtí a další pracovníci	1,9	1,9	0

Z uvedené tabulky vyplývá, že cca 80 % pracovní kapacity zaměstnanců ústavu tvořili pracovníci ve výzkumných týmech. Z těchto pracovníků (FO) mělo 89 % ukončené VŠ vzdělání a z nich bylo 60 % vědeckých pracovníků (získali Ph.D. titul nebo jeho ekvivalent) a 31 % studentů doktorského studia.

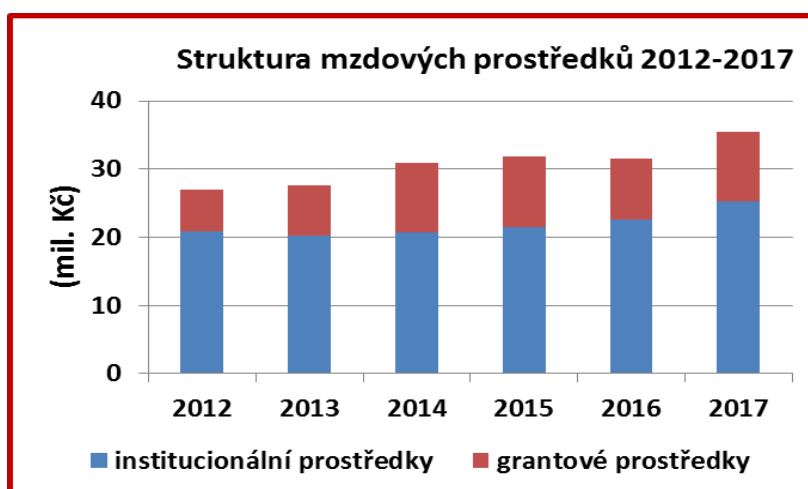
V roce 2017 bylo přijato 6 pracovníků, kteří byli zařazeni do výzkumných týmů. Při přijímání nových pracovníků je kladen důraz především na odbornost, vědeckou úroveň a perspektivu pracovníka. Pracovní poměr ukončilo 6 pracovníků, z nichž 3 byli pregraduální studenti.

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. 2017 bylo na ústavu zaměstnáno 13 studentů DSP a 8 pregraduálních studentů.

Věková struktura výzkumných pracovníků ústavu je příznivá. V následujícím obrázku je zobrazen vývoj věkové struktury výzkumných pracovníků v letech 2014 – 2017 s výhledem na r. 2018. Počet fyzických osob v nejnižší věkové kategorii je ve skutečnosti výrazně vyšší, protože významný podíl těchto pracovníků tvoří studenti pracující na částečný pracovní úvazek. Průměrný věk pracovníků ve vědeckých útvarech zůstává ve srovnání s předchozím rokem přibližně stejný, 45 let.



Mzdové prostředky z dotace zřizovatele v r. 2017 činily cca 70 % z celkem vyplacených mzdových prostředků. Průměrná mzda ve výši 42 942 Kč s meziročním nárůstem ve výši 8.6% přesahuje celoakademický průměr o cca 3 400 Kč.



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.



## Výroční zpráva o poskytování informací za rok 2017

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

**0**

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 2017 jako její samostatná část s názvem „Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb., o svobodném přístupu k informacím“.

27. února 2018

Ing. Kamil Lang, CSc., DSc.  
pověřený řízením ústavu

V Řeži, 16. dubna 2018

Ing. Kamil Lang, CSc., DSc.  
pověřený řízením

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