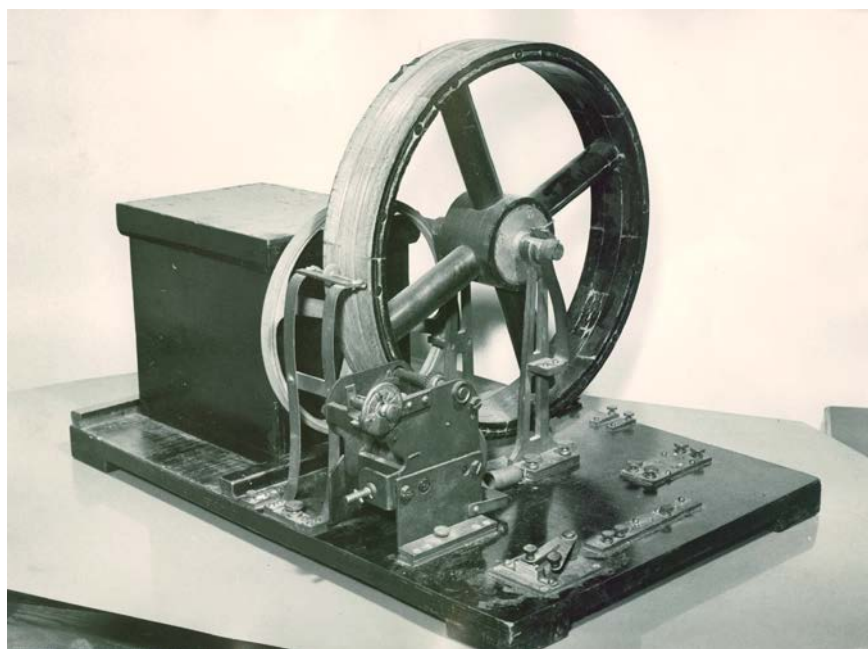


Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.



# VÝROČNÍ ZPRÁVA

O ČINNOSTI A HOSPODAŘENÍ ZA ROK 2017

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.

IČ: 61388955

Sídlo: Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8

Dozorčí radou instituce projednána dne: 11. června 2018

Radou instituce schválena dne: 15. června 2018

V Praze dne 18. června 2018

## Obsah

I. Informace o složení orgánů veřejné výzkumné instituce a o jejich činnosti .....	4
A) Výchozí složení orgánů pracoviště .....	4
Ředitel instituce.....	4
Rada instituce.....	4
Dozorčí rada.....	5
B) Změny ve složení orgánů .....	5
Ředitel instituce.....	5
Rada instituce.....	5
Dozorčí rada.....	6
C) Informace o činnosti orgánů: .....	6
Ředitel instituce.....	6
Rada instituce.....	6
Dozorčí rada.....	8
II. Informace o změnách zřizovací listiny.....	9
III. Hodnocení hlavní činnosti.....	10
III. 1. Nejvýznamnější výsledky.....	10
Oddělení biofyzikální chemie.....	11
Oddělení nízkodimenzionálních systémů .....	12
Oddělení spektroskopie .....	13
Oddělení struktury a dynamiky v katalýze .....	14
Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy .....	15
Oddělení elektrochemie v nanoměřítku .....	17
Oddělení elektrochemických materiálů.....	18
Oddělení dynamiky molekul a klastrů.....	19
Oddělení teoretické chemie .....	20
Oddělení chemie iontů v plynné fázi .....	21
Nejvýznamnější publikace: .....	22
III.2 Výzkumné projekty .....	25
III. 3. Ocenění.....	25
III. 4. Propagace a popularizace .....	26
Vybrané pořady v České televizi:.....	27
Popularizační programy pro zájemce o přírodní vědy: .....	27
Přehled nejvýznamnějších popularizačně-vzdělávacích programů a akcí: .....	27
III. 5. Vědecká a pedagogická spolupráce pracoviště s vysokými školami.....	28
III. 6. Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou .....	30

Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané řešením projektů.....	30
Společné projekty výzkumu a vývoje podpořené z veřejných prostředků:.....	31
Výsledky spolupráce se státní a veřejnou správou.....	32
Odborné expertizy zpracované v písemné formě pro státní orgány, instituce a podnikatelské subjekty .....	33
Informace o zaměstnancích pracoviště, kteří zastávali funkce v řídicích orgánech významných mezinárodních vědeckých organizací.....	33
III. 7. Hospodářské smlouvy .....	33
III. 8. Mezinárodní vědecká spolupráce .....	36
III.9. Konference a zahraniční hosté.....	37
Konference s mezinárodní účastí: .....	37
Významné vědecké akce na národní úrovni, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spolupořadatel:.....	38
Zahraniční hosté ústavu:.....	39
IV. Hodnocení další a jiné činnosti:.....	40
V. Informace o opatřeních k odstranění nedostatků v hospodaření a zpráva, jak byla splněna opatření k odstranění nedostatků uložená v předchozím roce: .....	41
VI. Finanční informace o skutečnostech, které jsou významné z hlediska posouzení hospodářského postavení instituce a mohou mít vliv na její vývoj .....	41
VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště.....	42
VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí.....	43
IX. Aktivity v oblasti pracovně-právních vztahů .....	43
X. Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb. , o svobodném přístupu k informacím .....	44

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

### A) Výchozí složení orgánů pracoviště

#### Ředitel instituce

Prof. RNDr. Zdeněk Samec, DrSc.

Jmenován s účinností od: 1. 5. 2012

#### Rada instituce

zvolena dne: 24. 1. 2012 ve složení:

**Předseda:** prof. RNDr. Patrik Španěl, Dr. rer. nat.

**Místopředseda:** prof. RNDr. Ladislav Kavan, DSc.

#### Interní členové (ÚFCH JH)

doc. Michal Fárník, Ph.D., DSc.

Prof. Martin Hof, Dr. rer. nat. DSc.

Mgr. Michal Horáček, Ph.D.

Prof. RNDr. Jiří Ludvík, CSc.

doc. Jiří Pittner, Dr. rer. nat., DSc.

Prof. RNDr. Zdeněk Samec, DrSc.

doc. Ing. Zdeněk Sobalík, CSc.

#### Externí členové

Prof. RNDr. Jiří Barek, CSc., Přírodovědecká fakulta University Karlovy v Praze

Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, Fakulta chemické technologie Vysoké školy chemicko-technologické v Praze

doc. RNDr. Tomáš Obšil, Ph.D., Přírodovědecká fakulta University Karlovy v Praze

Prof. RNDr. Petr Štěpnička, Ph.D., Přírodovědecká fakulta University Karlovy v Praze

Prof. RNDr. Eva Tesařová, CSc., Přírodovědecká fakulta University Karlovy v Praze

## Dozorčí rada

**Předseda:** Ing. Karel Aim, CSc., člen Akademické rady AV ČR

**Místopředseda:** RNDr. Jan Hrušák, CSc.

### Členové:

Ing. Zbyněk Černý, CSc., Ústav anorganické chemie, AV ČR, v. v. i.

Ing. Milan Petrák, Technopark Kralupy, Kralupy nad Vltavou

doc. Ing. Jiří Homola, DSc., Ústav fotoniky a elektroniky, AV ČR, v. v. i.

## B) Změny ve složení orgánů

### Ředitel instituce

Ke dni 30.4.2017 skončilo pětileté funkční období ředitele prof. RNDr. Z. Samce, DrSc.

prof. Martin Hof, Dr. Rer. Nat., DSc., byl jmenován ředitelem pro funkční období 1.5.2017 – 30.4.2022.

### Rada instituce

K 23. lednu 2017 skončilo pětileté funkční období Rady instituce. Rada ÚFCH JH byla zvolena řádným shromážděním výzkumných pracovníků dne 23.1.2017 pro funkční období 24.1.2017 - 23.1.2022 ve složení

### Interní členové

prof. RNDr. Patrik Španěl, Dr. rer. nat.

prof. RNDr. Ladislav Kavan, DSc.

Mgr. Michal Horáček, Ph.D.

doc. Jiří Pittner, Dr. rer. nat., DSc.

prof. RNDr. Zdeněk Samec, DrSc

Mgr. Jiří Dědeček, CSc. DSc.

RNDr. Martin Ferus, Ph.D.

Mgr. Magdaléna Hromadová, Ph.D.

RNDr. Ing. Martin Kalbáč, Ph.D.

### Externí členové

prof. RNDr. Jiří Barek, CSc., Přírodovědecká fakulta University Karlovy v Praze

prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, Fakulta chemické technologie Vysoké školy chemicko-technologické v Praze

prof. RNDr. Eva Tesařová, CSc., Přírodovědecká fakulta University Karlovy v Praze

prof. Mgr. Pavel Jungwirth, DSc., Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i.

prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka, Fakulta chemicko inženýrská Vysoké školy chemicko-technologické v Praze

Na prvním zasedání této Rady dne 2.2.2017 byl zvolen předsedou prof. RNDr. Patrik Španěl, Dr. rer. nat. místopředsedou prof. RNDr. Ladislav Kavan a tajemníkem byl jmenován Pavel Pásztor.

## Dozorčí rada

Dozorčí rada byla jmenována Akademickou Radou AV ČR dne 22.3.2017 pro funkční období 1.5.2017-30.4.2022 ve složení

Ing. Petr Bobák, CSc. (předseda),  
prof. Ing. Jiří Homola, DSc.  
doc. Mgr. Iva Matolínová, Dr.

přičemž RNDr. Jan Hrušák, CSc. (místopředseda) a Ing. Zbyněk Černý, CSc. pokračují na základě jmenování v předchozím funkčním období.

## C) Informace o činnosti orgánů:

### Ředitel instituce

Hlavní aktivity ředitele v řízení instituce:

- a) organizace jednání kolegia ředitele, které se v roce 2017 konalo celkem 11x; závěry z jednání jsou zveřejněny na interních webovských stránkách ústavu,
- b) předložení návrhu rozpočtu na rok 2017 Dozorčí radě k vyjádření a Radě instituce ke schválení,
- c) předložení Výroční zprávy o činnosti a hospodaření za rok 2016 po ověření účetní závěrky auditorem Dozorčí radě k vyjádření a Radě instituce ke schválení,
- d) podání návrhů na Prémii Otto Wichterleho, Hlávkovu cenu a Premium Academiae,
- e) předložení návrhů k úkonům vyžadujícím předchozí souhlas Dozorčí rady této radě ke schválení,
- f) příprava a uzavření dodatku Kolektivní smlouvy s Odborovou organizací týkajícího se zásad a rozpočtu čerpání ze sociálního fondu v roce 2017,
- g) přijetí nových pracovníků na základě konkurzního řízení a rozhodnutí o prodloužení nebo novém zařazení pracovníků ústavu na základě jejich atestace,
- h) organizace 27. Brdičkovy přednášky,
- ch) příprava podkladů pro jednání vedení pracoviště s vedením AVČR o hodnocení výzkumné a odborné činnosti pracovišť AV ČR v období let 2016 – 2017.
- i) Zavedení pozic mladých vědeckých pracovníků

### Rada instituce

V roce 2017 se jednání Rady instituce uskutečnilo celkem 15 krát, z toho 12 jednání proběhla formou hlasování per rollam.

#### *1. Zasedání RI (02.02.2017)*

předsedou Rady byl zvolen prof. RNDr. Patrik Španěl, Dr. ret. nat. a místopředsedou rady byl zvolen prof. RNDr. Ladislav Kavan, DSc. Po dohodě s ředitelem Rada odvolává z funkce tajemnice Mgr. Kristýnu Sovovou, PhD. a jmenuje do funkce tajemníka Pavla Pásztora.

Rada ústavu schválila zápisy a usnesení z 16. zasedání

### *2. Zasedání RI (11. 04. 2017)*

Rada schválila zápis a usnesení z 1. zasedání Rady

Rada schválila zápis a usnesení z jednání per rollam ze dne 21.3.2017 – návrh na Prémii Otto Wichterleho i zápis a usnesení per rollam ze dne 5.4.2017 – návrhy projektů GAČR.

Rada schvaluje Výroční zprávu o činnosti a hospodaření za rok 2016, včetně zprávy nezávislého auditora, ve znění projednaném dozorčí radou.

Rada schvaluje rozpočet na rok 2017 ve znění projednaném dozorčí radou.

Rada schvaluje organizační řád v předloženém znění.

Rada schvaluje Přílohu 1 a Přílohu 2 ke mzdovému předpisu, se změnou Tarifního rozpětí v Tarifní třídě V3 a v Tarifní třídě V6.

Rada doporučuje podání žádosti o mzdovou podporu pro Mgr. Ekaterinu Zanozinu, Ph.D.

### *3. Zasedání RI (27.09.2017)*

- Rada schválila zápis a usnesení z 2. zasedání Rady

- Rada schválila zápis a usnesení z jednání per rollam ze dne 12.5.2017 – Návrhy projektů TAČR podávaných v roce 2017, 26.6.2017 – Návrhy projektů do soutěže TRIO a návrhy projektů do soutěže Mobility podávaných v roce 2017, 28.7.2017 – Návrh do soutěže programu Mezinárodní spolupráce ve výzkumu a vývoji, 16.8.2017 Návrh podání žádosti o udělení Fellowshipu J.E.Purkyně pro Dr. Hidetsugu Shiozawu

- Rada schválila změnu organizační struktury Ústavu: ruší se „Oddělení syntézy a katalýzy“, zřizuje se „Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy“ a mění se název „Oddělení molekulární elektrochemie“ na „Oddělení elektrochemie v nanoměřítku“.

- Rada schválila podání žádosti o podporu z Programu podpory perspektivních lidských zdrojů – Mzdová podpora postdoktorandů na pracovištích AV ČR pro následující kandidáty v tomto pořadí: Mgr. Alan Liška, Ph.D., Mgr. Petra Riegerová, Ph.D., Mgr. Milan Bouša.

- Rada schvaluje vytvoření „Smlouvy o spolupráci s Přírodovědeckou fakultou UK“ umožňující vytváření společných pracovišť a doporučuje její následné uzavření.

#### *Rada instituce schválila per rollam následující usnesení:*

Rada instituce schválila nominaci RNDr. Radka Šachla, Ph.D. a Mariany Manuely Salgado da Costa Amaro, Ph.D. na Prémii Otto Wichterleho. (21.03.2017)

Rada instituce doporučuje podání všech předložených návrhů projektů GAČR. (05.04.2017)

Rada instituce doporučuje podání všech předložených návrhů projektů TAČR. (12.05.2017)

Rada instituce doporučuje podání všech předložených návrhů projektů programu TRIO i všech předložených návrhů projektů programu Mobility. (26.06.2017)

Rada instituce doporučuje podání předloženého návrhu projektu programu Mezinárodní spolupráce ve výzkumu a vývoji (28.07.2017)



Rada instituce doporučuje podání žádosti o udělení Fellowshipu J.E.Purkyně pro Dr. Hidetsugu Shiozawu. (16.08.2017)

Rada instituce doporučuje podání žádosti projektu „Implementace pokročilých fyzikálně-chemických přístupů pro studium moderních materiálů a bio/chemických procesů“ v Operačním programu Výzkum, vývoj a vzdělávání MŠMT. (03.10.2017)

Rada instituce doporučuje podání žádostí o podporu obou projektů do soutěže MŠMT Program č. 7 - Podpora nadaných žáků základních a středních škol v roce 2018 (24.10.2017)

Rada instituce doporučuje podání předloženého návrhu projektu „ERA Chair at J. Heyrovsky Institute - The institutional approach towards ERA“

Early Stage Researchers nastupující v rámci projektů ITN ESR budou zařazeni do tarifních tříd V2 nebo V1. Mzda bude vyměřena tak aby včetně osobního příplatku odpovídala zaručené částce podle grantové smlouvy (podle čl. 9 odstavce (3) mzdového předpisu). V pracovní smlouvě bude výslovně uvedeno, že je zaručena mzda, na kterou je nárok podle projektu po dobu 36 měsíců. (06.11.2017)

Rada instituce doporučuje podání obou žádostí o dotaci z programu Regionální spolupráce krajů a ústavů AVČR. (14.11.2017)

Rada instituce doporučuje podání projektu do soutěže INTER-COST (LTC18) (29.11.2017)

Rada instituce doporučuje podání obou žádostí grantových projektů v rámci soutěže Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Networks.

Rada instituce schvaluje nové znění vnitřního mzdového předpisu Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i. (20.12. 2017)

### **Dozorčí rada**

V roce 2017 proběhla dvě zasedání Dozorčí rady Ústavu fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR, v. v. i., dne 10.4. a 13.7. 2017 a pět jednání per rollam k datům 6.1., 3. 2., 18. 5. a 20.11. 2017.

#### *Zasedání DR dne 10. 4. a 13. 7. 2017*

Hlavní body jednání a nejdůležitější body usnesení DR:

DR souhlasí s návrhem rozpočtu ÚFCH JH na rok 2017.

DR souhlasí s Výroční zprávou o činnosti a hospodaření za rok 2016.

DR bere na vědomí Zprávu nezávislého auditora o ověření účetní uzávěrky za rok 2016.

DR schvaluje Zprávu o činnosti DR za rok 2016.

DR určuje auditorem pro ověření účetní uzávěrky za rok 2017 dle Smlouvy o provedení auditu Ing. L. Ježka.

DR souhlasí s uzavřením Smlouvy o zřízení věcného břemene s firmou PREdistribuce, a. s. (Svornosti 3199/19a, 150 00, Praha 5).

#### *Dozorčí rada schválila per rollam následující usnesení:*

1) DR vydává předchozí písemný souhlas (podle ustanovení §19, odst. 1, písm. b), bod 3 zákona č. 341/2005 Sb.) ke zřízení věcného břemene - zřízení služebnosti inženýrské

sítě v souvislosti s veřejným osvětlením na pozemcích vlastníků v areálu Mazanka, kterou připravilo SSC.

Schválení proběhlo formou per rollam č. 37 k datu 6. 1. 2017.

2) DR vydává předchozí písemný souhlas (podle ustanovení §19, odst. 1, písm. b), bod 3 zákona č. 341/2005 Sb.) ke zřízení věcného břemene - zřízení služebnosti inženýrské sítě v souvislosti s vedením inženýrské sítě HDPE chrániček pro optické, telefonní a jiné kabely pro služby elektronických komunikací na pozemcích vlastníků v areálu Mazanka.

Schválení proběhlo formou per rollam č. 38 k datu 3. 2. 2017.

3) DR schvaluje dle předloženého návrhu hodnocení manažerských schopností ředitele ÚFCH JH prof. RNDr. Zdeňka Samce, DrSc.

Schválení proběhlo formou per rollam č. 39 k datu 18. 5. 2017.

4) DR souhlasí (s připomínkami) se Smlouvou o nájmu prostoru sloužícího podnikání s firmou IVR s.r.o. (se sídlem Kostelecká 908, 196 00 Praha 9 Čakovice).

*Uzavřena na základě dohody smluvních stran podle ustanovení §2302 zákon č.89/2012 Sb., občanský zákoník v platném znění.*

Schválení proběhlo formou per rollam č. 40 k datu 20. 11. 2017.

5) DR souhlasí (s připomínkami) se Smlouvou o nájmu prostoru sloužícího podnikání s firmou M-Catering s.r.o. (se sídlem Kardašovská 691,198 00 Praha 9).

*Uzavřena na základě dohody smluvních stran podle ustanovení §2302 zákon č.89/2012 Sb., občanský zákoník v platném znění.*

Schválení proběhlo formou per rollam č. 41 k datu 20. 11. 2017.

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

Ve Zřizovací listině nebyly v roce 2017 učiněny žádné změny.

### III. Hodnocení hlavní činnosti

V souladu s platnou zřizovací listinou ústav uskutečňuje vědecký výzkum v oblasti **fyzikální chemie, elektrochemie, analytické chemie a chemické fyziky** a vyhledává možnosti využití jeho výsledků.

Podle platné zřizovací listiny ve znění dodatku ze dne 22. června 2010 je předmětem hlavní činnosti ÚFCH JH vědecký výzkum ve fyzikální chemii, elektrochemii, analytické chemii a chemické fyzice, a to zejména výzkum struktury látek a jejich vlastností, výzkum elementárních dějů chemických reakcí a procesů, výzkum chemických a fyzikálně-chemických procesů v homogenní fázi a na rozhraní fází, příprava a vývoj chemických sloučenin, materiálů a technologií, vývoj speciálních fyzikálních a fyzikálně-chemických metod a zařízení a vývoj počítačových programů pro kvantově-chemické a další teoretické výpočty v oborech činnosti pracoviště a pro řízení experimentů a zpracovávání jejich výsledků. Svou činností ÚFCH JH přispívá ke zvyšování úrovně poznání a vzdělanosti a k využití výsledků vědeckého výzkumu v praxi. Získává, zpracovává a rozšiřuje vědecké informace, vydává vědecké publikace (monografie, časopisy, sborníky apod.), poskytuje vědecké posudky, stanoviska a doporučení a provádí konzultační a poradenskou činnost. Ve spolupráci s vysokými školami uskutečňuje doktorské studijní programy a vychovává vědecké pracovníky. Pořádá pro studenty přednáškové kurzy, cvičení a praktika. V rámci předmětu své činnosti rozvíjí mezinárodní spolupráci, včetně organizování společného výzkumu se zahraničními partnery, přijímání a vysílání stážistů, výměny vědeckých poznatků a přípravy společných publikací. Pořádá domácí i mezinárodní vědecká setkání, konference, semináře a přednášky a zajišťuje infrastrukturu výzkumu, včetně poskytování ubytování svým zaměstnancům a hostům a zajišťování závodního stravování v jídelně areálu AV ČR Mazanka pro pracovníky pracovišť Akademie věd ČR. Úkoly realizuje samostatně i ve spolupráci s vysokými školami a dalšími vědeckými a odbornými institucemi.

Ústav v roce 2017 pokračoval v teoretickém i experimentálním výzkumu ve vybraných oblastech chemické fyziky, elektrochemie, katalýzy a přílehlých oborů. Výzkumná činnost probíhá v 10 odděleních a 2 centrech.

#### III. 1. Nejvýznamnější výsledky

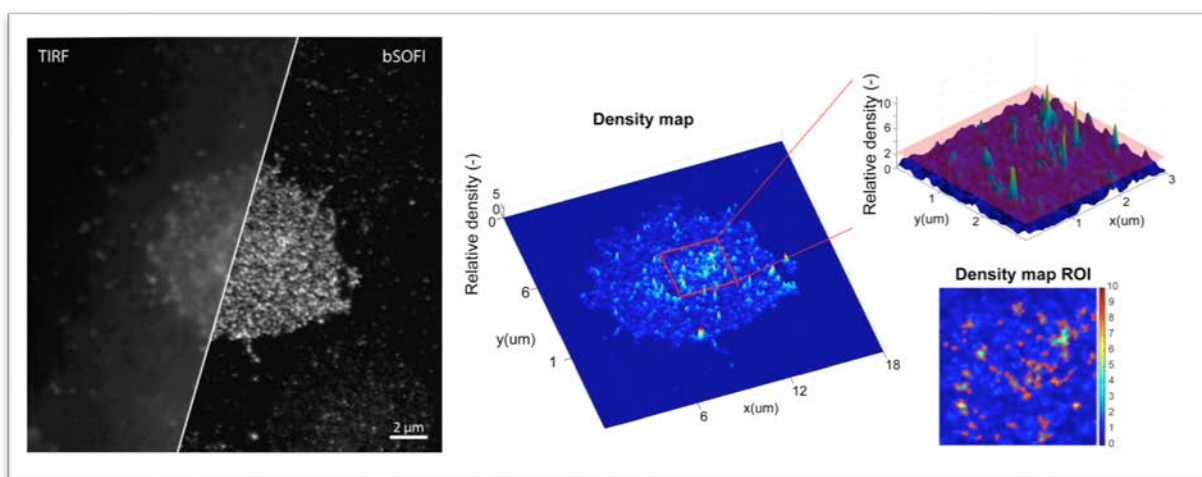
V rámci řešení výzkumného záměru a grantových projektů byly dosaženy v jednotlivých odděleních významné výsledky uvedené v této sekci.

(První tři výsledky přehledu byly zahrnuty jako nejvýznamnější výsledky pracoviště do podkladů pro Výroční zprávu Akademie věd ČR za rok 2017).

## Oddělení biofyzikální chemie

**Kvantifikace shluků membránových proteinů pomocí mikroskopie s vysokým rozlišením**

Vývoj moderních mikroskopických metod s vysokým rozlišením umožnil kvantifikaci proteinových shluků v živých buňkách. Dosavadní přístupy však byly omezeny na oblasti s nízkou hustotou proteinů. Byla vyvinuta a experimentálně ověřena nová metoda, která umožňuje kvantitativní molekulární obrazovou analýzu shluků také v oblastech s vysokou hustotou proteinů i za neideálních experimentálních podmínek. Metoda přináší nové možnosti sledování distribuce důležitých povrchových molekul s vysokou přesností za fyziologických i patologických podmínek. Spolupracující subjekt: EPFL, Lausanne, Švýcarsko.



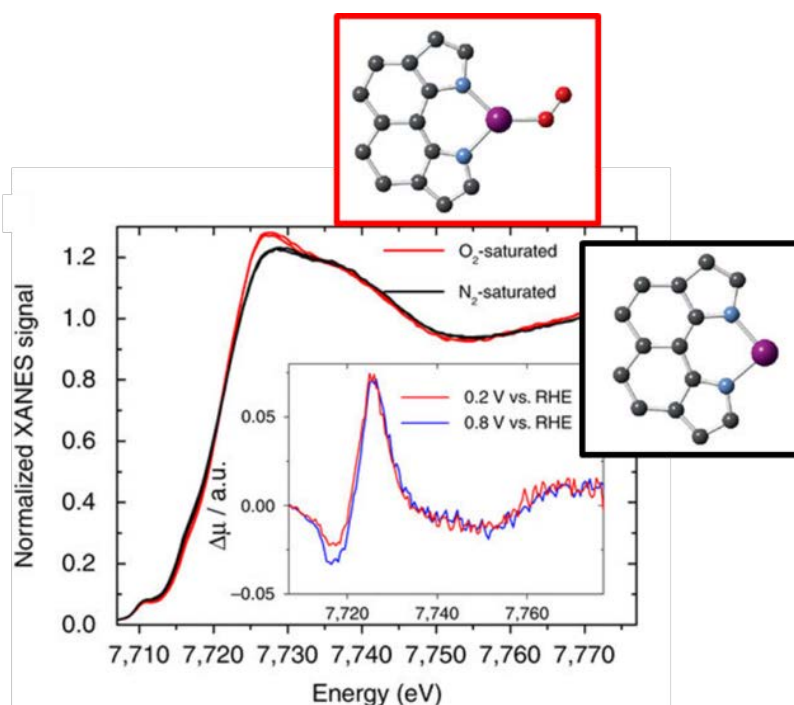
**Kvantitativní analýza proteinu CD4 na povrchu T buněk.** Obrázek vlevo ilustruje zlepšení kvality zobrazování membránových proteinů použitím mikroskopie s vysokým rozlišením (v pravé části) ve srovnání se standardní mikroskopií (v levé části). Obrázek uprostřed prezentuje plastickou mapu rozmístění molekul CD4 na povrchu T buněk. Na horním obrázku vpravo jsou tato kvantitativní data ve zvětšeném výseku. Spodní obrázek vpravo zobrazuje oblasti s různou hustotou proteinů (červeně ohraničené oblasti znamenají akumulaci molekul CD4 do shluků, zatímco modré oblasti odpovídají náhodnému rozmístění těchto proteinů).

Lukeš T, Glatzová D, Kvíčalová D, Levet F, Benda A, Letschert S, Sauer M, Brdička T, Lasser T and Cebeauer M. Quantifying protein densities on cell membranes using super-resolution optical fluctuation imaging. *Nature Comm*, 2017, 8, 1731, doi:10.1038/s41467-017-01857-x.

## Oddělení nízkodimenzionálních systémů

**Identifikace katalyticky aktivních míst redukce kyslíku v materiálech na bázi kobaltu, dusíku a uhlíku**

Byla identifikována aktivní povrchová místa zodpovědná za aktivitu katalyzátorů na bázi Co-N-C makrocyclech v reakci redukce kyslíku v kyselém prostředí. Výsledků bylo dosaženo kombinací klasické elektrochemie kombinované s in-operando rentgenovou absorpční spektroskopií. Reakce redukce kyslíku je určujícím procesem rozšíření technologie palivových článků, která je nezbytná pro postupné nahrazení energetických zdrojů založených na fosilních palivech obnovitelnými zdroji. Současné technologie používají k redukcí kyslíku katalyzátory na bázi Pt. Materiály, které nevyužívají vzácné kovy, představují jejich jedinou alternativu, která je schopná garantovat nutnou aktivitu, stabilitu a rentabilitu. Spolupracující subjekt: Institute Charles Gerhardt Montpellier, Northeastern University, Le Soleil Synchrotron, Massachusetts Institute of Technology, Kyushu University.



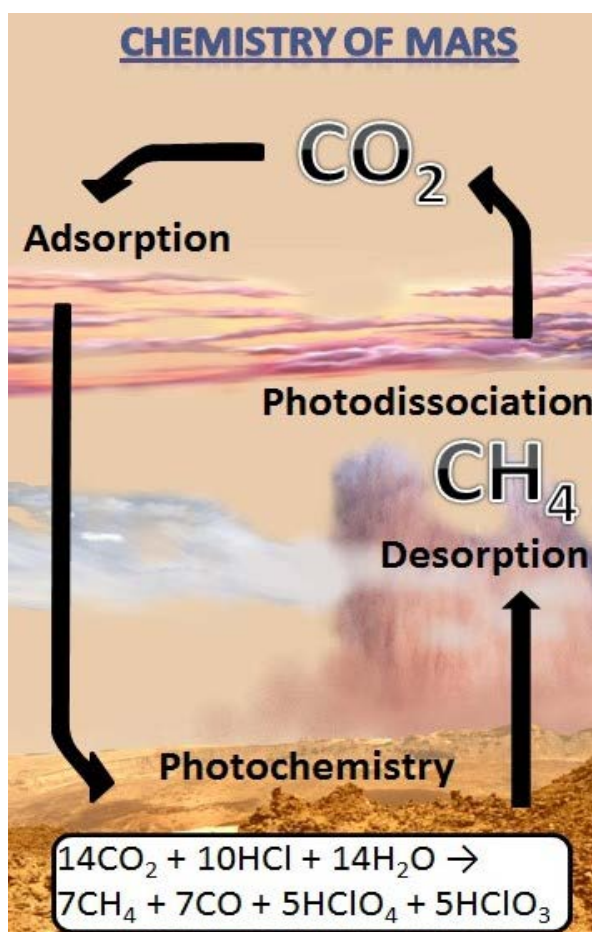
***In-operando XAS identifikace aktivních míst katalyzátorů na bázi Co-N-C makrocycloů.*** Experimentální XANES spektra Co-N-C makrocycloů při potenciálu 0.2 V (vs. RHE) v 0.05 M kyselině sírové. Červeně označená struktura znázorňuje strukturu aktivního místa při daném potenciálu za přítomnosti kyslíku. Černě označená struktura odpovídá Co-N-C makrocyclovi v inaktivním stavu.

Andrea Zitolo, Nastaran Ranjbar-Sahraie, Tzonka Mineva, Jingkun Li, Qingying Jia, Serban Stamin, George F. Harrington, Stephen Mathew Lyth, Petr Krtil, Sanjeev Mukerjee, Emiliano Fonda and Frédéric Jaouen, Identification of catalytic sites in cobalt-nitrogen-carbon materials for the oxygen reduction reaction, **Nature Comm**, 2017, 8, 957.

## Oddělení spektroskopie

### Vznik methanu a biomolekul v CO<sub>2</sub>-cyklu na terestrických planetách

Výzkum chemické evoluce raných terestrických planet zahrnuje také problematiku složení jejich atmosfér a plausibilitu syntézy biomolekul. V naší studii byl formulován nový scénář vzniku methanu na Marsu a jiných terestrických planetách. Oxid uhličitý může být zcela abiotickými procesy převeden na směs reaktivních redukčních plynů, methanu a oxidu uhelnatého. Tzv. methanogeneze probíhá podle našich zjištění na povrch porézních fotokatalytických materiálů ozařováním měkkým ultrafialovým zářením. Na raných planetách pak následným reprocessingem vlivem impaktů mimozemských těles může docházet k procesům syntézy biomolekul po iniciaci rázovou vlnou. Navržený mechanismus odpovídá nejen na otázku fotochemického původu methanu na Marsu, ale také dobře vysvětluje sezónní proměnlivost jeho koncentrací v martánské atmosféře.



*Cyklus CO<sub>2</sub> na Marsu. Chemický pochod methanogeneze na Marsu lze vysvětlit sorpcí CO<sub>2</sub> na porézních kyselých minerálech, vznik CH<sub>4</sub> iniciovaný UV zářením, které produkuje též CO a následný rozklad zpět za vzniku CO<sub>2</sub> fotochemickými reakcemi v atmosféře.*

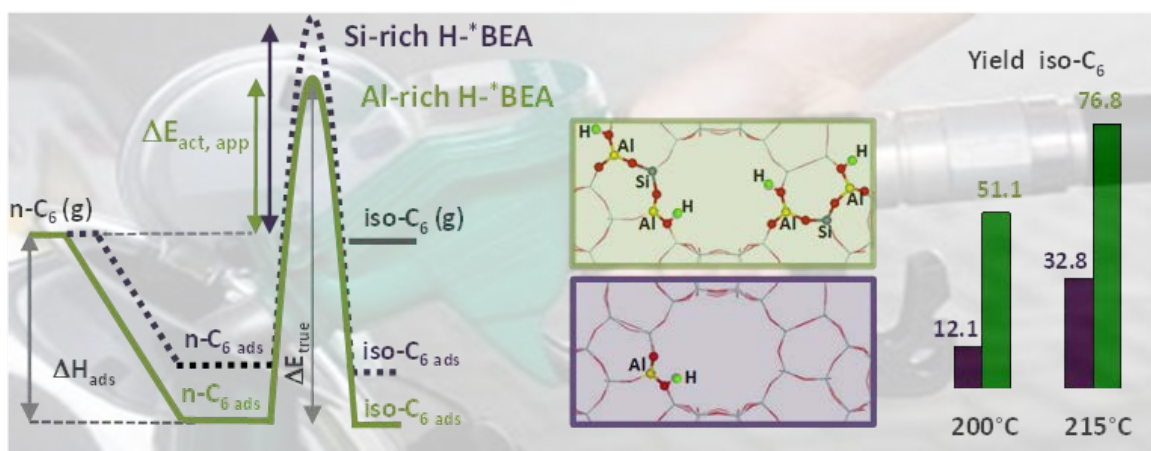
Svatopluk Civiš, Antonín Knížek, Ondřej Ivanek, Petr Kubelík, Markéta Zúkalová, Ladislav Kavan and Martin Ferus, The origin of methane and biomolecules from a CO<sub>2</sub> cycle on terrestrial planets, **Nature Astronomy**, 2017, 1, 721-726.



## Oddělení struktury a dynamiky v katalýze

## Nová koncepce pro tvorbu vysoce aktivního katalyzátoru na bázi zeolitu pro průmyslově relevantní hydroizomerizaci lineárních alkanů

Skeletální izomerizace lineárních alkanů, nezbytná reakce pro výrobu benzínu, se opírá o environmentálně sporné chlorované katalyzátory, jejichž aktivita přesahuje aktivitu zeolitových katalyzátorů. Objevili jsme nové aktivní struktury tvořené na sub-nano úrovni s vysokou aktivitou a navrhli nový zeolitový katalyzátor, který je neškodný pro životní prostředí. Výrobní proces katalyzátoru a katalytická technologie jsou vyvíjeny s renomovaným výrobcem katalyzátorů a inženýrskou společností. Spolupracující subjekty: Chemoprojekt, a.s., Euro Support Manufacturing Czechia, s.r.o.



**Dramatické zvýšení izomerizační aktivity na nanostrukturovaném Al-rich Pt/H-BEA katalyzátoru.** Dosažení vysoké koncentrace neinteragujících kyselých protonů (H<sup>+</sup>) v zeolitovém katalyzátoru umožnilo dramatické zvýšení izomerizační aktivity a posun provozní teploty do termodynamicky výhodnější oblasti pro rozvětvené izomery nezbytné pro výrobu vysoce kvalitních benzínů.

J. Pastvova, D. Kaucky, J. Moravkova, J. Rathousky, S. Sklenak, M. Vorokhta, L. Brabec, R. Pilar, I. Jakubec, E. Tabor, P. Klein, P. Sazama: The effect of enhanced accessibility of acid sites in microporous mordenite zeolites on hydroisomerization of n-hexane, *ACS Catalysis*, 2017, 7, 5781-5795.

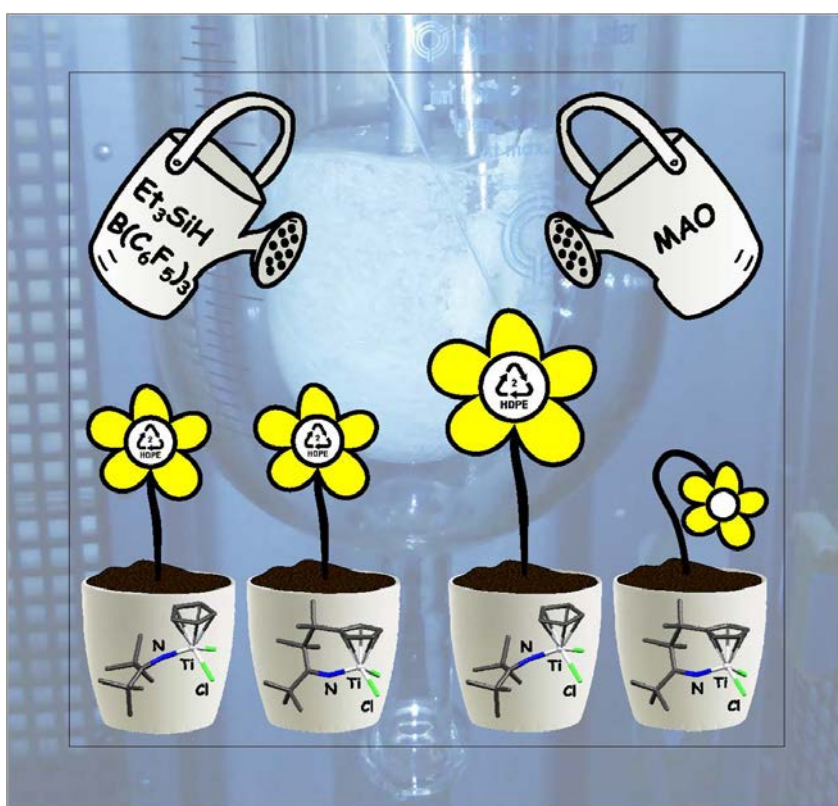
J. Moravkova, D. Kaucky, J. Pastvova, P. Sazama: Katalyzátor pro hydroizomerizaci alkanů C4-C7, jeho příprava a použití, *Patent application* PV 2017-6.

P. Sazama, D. Kaucky, Z. Sobalík: Nízkoteplotní hydroizomerizace lehkých parafínů s použitím vysoce účinného katalyzátoru na bázi zeolitu, *Patent number* CZ306410.

## Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy

**Nový katalytický systém bez obsahu hliníku využívající adukty hydrosilanu a boranu jako aktivátory přechodných kovů při polymeraci etylénu**

Katalytický systém využívající adukty hydrosilanu a boranu jako aktivátory přechodných kovů byl poprvé úspěšně využit pro aktivaci titanových komplexů. Byl zkoumán vliv geometrie ketimidového ligandu v polo-sendvičových komplexech titanu a následný efekt při katalytické polymerizaci olefinů. Výsledky ukazují důležitost struktury katalyzátoru a zvláště volby aktivátoru na polymerizační aktivitu systému. Prokázalo se, že komplex s ketimidovou skupinou vázanou na cyklopentadienylový ligand je málo aktivní, pokud je jako aktivátor použit methylaluminoxan. Naopak při použití připraveného aktivačního systému bez obsahu hliníku, založeném na aduktech hydrosilanu a boranu, je aktivita obou typů komplexů srovnatelná. Spolupracující subjekt: VŠCHT Praha.



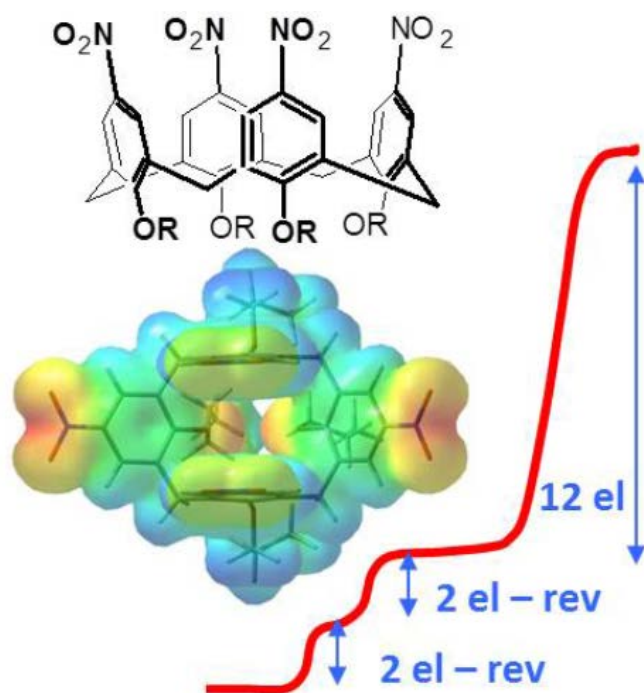
**Vliv odlišných typů aktivace katalyzátorů na jejich aktivitu při polymerizaci.** Ilustrace, (z obálky časopisu *Chem.Cat.Chem.*) zobrazuje rozdíly v aktivitě dvou polosendvičových ketimidových komplexů titanu (květiny v nádobách) při polymerizaci olefinů v závislosti na typu jejich aktivace (zalévací konve). Na pozadí ilustrace je zobrazen skleněný polymerizační autokláv naplněný vysráženým vysoko-hustotním polyetylénem připraveným jedním ze zobrazených katalytických systémů.

Vojtech Varga, Miloš Večeřa, Róbert Gyepes, Jiří Pinkas, Michal Horáček, Jan Merna, Martin Lamač: Effects of the Linking of Cyclopentadienyl and Ketimide Ligands in Titanium Half-Sandwich Olefin Polymerization Catalysts. *Chem.Cat.Chem.*, 2017, 9, 3160-3172.



### Stereoelektrochemie kalixarenů

Elektrochemie obecně poskytuje termodynamická nebo kinetická data pro analytické, syntetické nebo mechanistické účely. Tento předkládaný nový přístup ale ukazuje elektrochemii jako zdroj informací o aktuálním tvaru a geometrii studovaných molekul v roztoku, o jejich rigiditě a následně i o distribuci elektronů a jejich delokalizaci. Tento "stereochemický" přístup byl ukázán a ověřen na rozsáhlé sérii různě substituovaných oligonitro kalix[4]arenů, resp. thiakalix[4]arenů a výsledky byly potvrzeny kvantově chemickými výpočty. Látky byly syntetizovány na spolupracujícím pracovišti na VŠCHT v rámci společného grantu GAČR (prof. Pavel Lhoták a jeho tým).



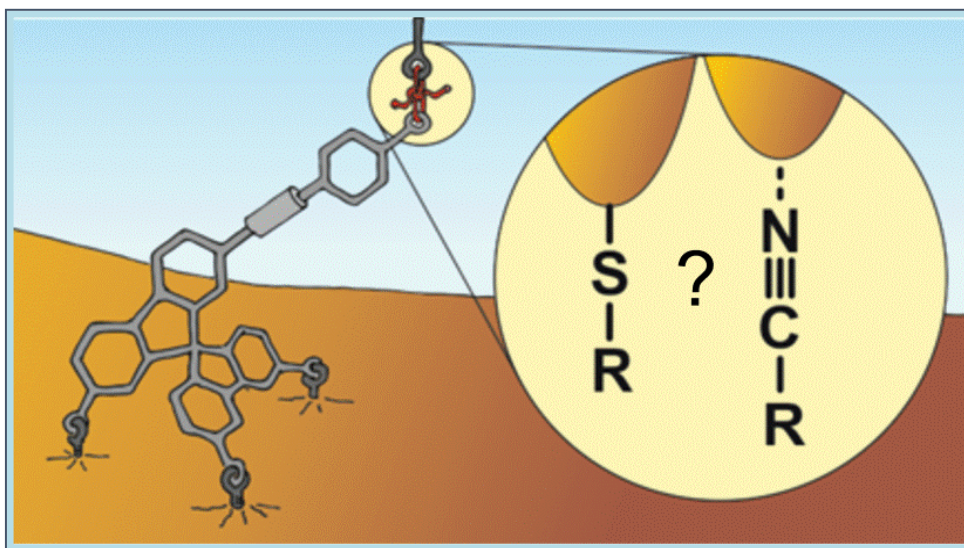
**Studovaný cone-p-tetranitrocalix[4]aren, polarografická křivka jeho redukce v DMF a vypočtený "smáčklý" tvar této molekuly.** Z existence dvou 2-elektronových vln polarografické křivky vyplývá, že zdánlivě kruhově symetrická molekula kalixarenu (= jako kalich) musí být ve skutečnosti "smáčklá", mající dva různé páry nitroskupin, které spolu elektronově nekomunikují. Experimentální výsledek byl potvrzen teoretickými výpočty.

Alan Liška, Jiří Ludvík: Stereoelectrochemistry of calixarenes – molecules with multiple redox centers. *Current Opinion in Electrochemistry*, 2018, 8, 45-51.

### Oddělení elektrochemie v nanoměřítku

#### Objev molekulárních věží s vhodnými nábojově transportními vlastnostmi s možností regulace transportního mechanismu pro molekulární elektroniku.

Bylo prokázáno, že nově navržené molekulární věže, které je možné ukotvit více než jednou skupinou k vodivému substrátu, vykazují vysokou molekulární vodivost. Změny transportního mechanismu ve vodivých můstcích tohoto typu lze docílit jednoduchou změnou kotvicích skupin na opačném konci molekuly. Spolupracující subjekt: Karlsruhe Institute of Technology, Německo.



**Vodivý molekulární můstek s typickým příkladem molekulární věže.** Schematické znázornění vodivého můstku s molekulární věží ilustrující možnost změny mechanismu transportu náboje změnou kotvicích skupin.

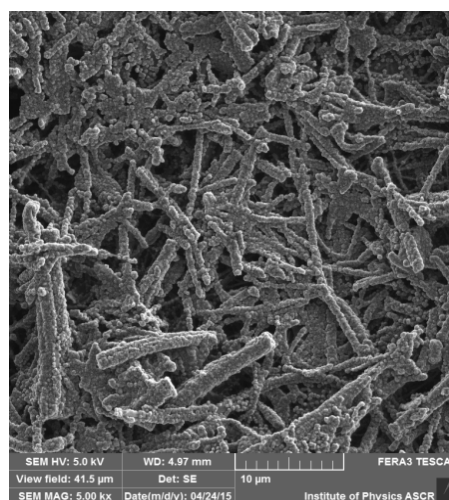
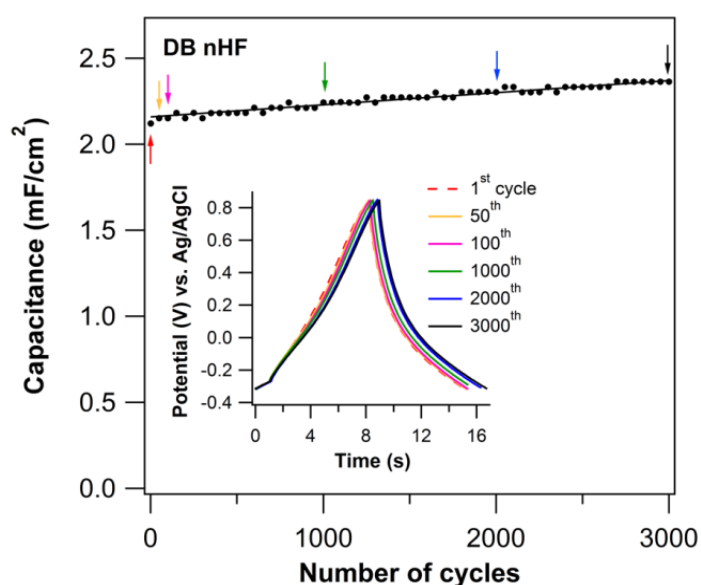
J. Šebera, V. Kolivoška, M. Valášek, J. Gasior, R. Sokolová, G. Mészáros, W. Hong, M. Mayor, M. Hromadová: Tuning Charge Transport Properties of Asymmetric Molecular Junctions. **J. Phys. Chem.**, 2017, C 121, 12885–12894.

T. Sebechlebská, J. Šebera, V. Kolivoška, M. Lindner, J. Gasior, G. Mészáros, M. Valášek, M. Mayor, M. Hromadová: Investigation of the geometrical arrangement and single molecule charge transport in self-assembled monolayers of molecular towers based on tetraphenylmethane tripod. **Electrochim. Acta**, 2017, <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2017.11.174>.

## Oddělení elektrochemických materiálů

## Příprava a elektrochemické aplikace elektrod na bázi grafenu a nanodiamantu.

Borem dopovaný nanodiamant byl připraven pomocí nových postupů včetně využití opticky transparentních substrátů a templátování SiO<sub>2</sub> nanovlákniny (Elmarco). Posledně jmenovaný materiál je slibný pro aplikace v superkondenzátorech. Podrobná charakterizace nanodiamantů byla provedena pomocí Ramanovy spektroskopie. Nový kompozitní katalyzátor Pt/grafen byl vyvinut pro barvivo senzibilizované solární články s Cu mediátorem. Svými vlastnostmi překonává všechny předchozí katalyzátory zejména při nízké intenzitě osvětlení. Spolupracující subjekt: FZÚ AVČR; EPFL, Lausanne, Švýcarsko.



**Nanovláknitá diamantová elektroda: nabíjecí/vybíjecí cykly (vlevo) a mikroskopická struktura (vpravo).** Levý graf: Závislost elektrochemické kapacity elektrody z nanovláknitého B- dopovaného diamantu na počtu galvanostatických nabíjecích/vybíjecích cyklů. Vsuška ukazuje příklady individuálních nabíjecích/vybíjecích cyklů. Elektrolyt: vodný roztok fosfátového pufru, proudová hustota 0.3 mA/cm<sup>2</sup>. Vpravo je znázorněn obrázek nanovláknité diamantové elektrody získaný pomocí řádkového elektronového mikroskopu.

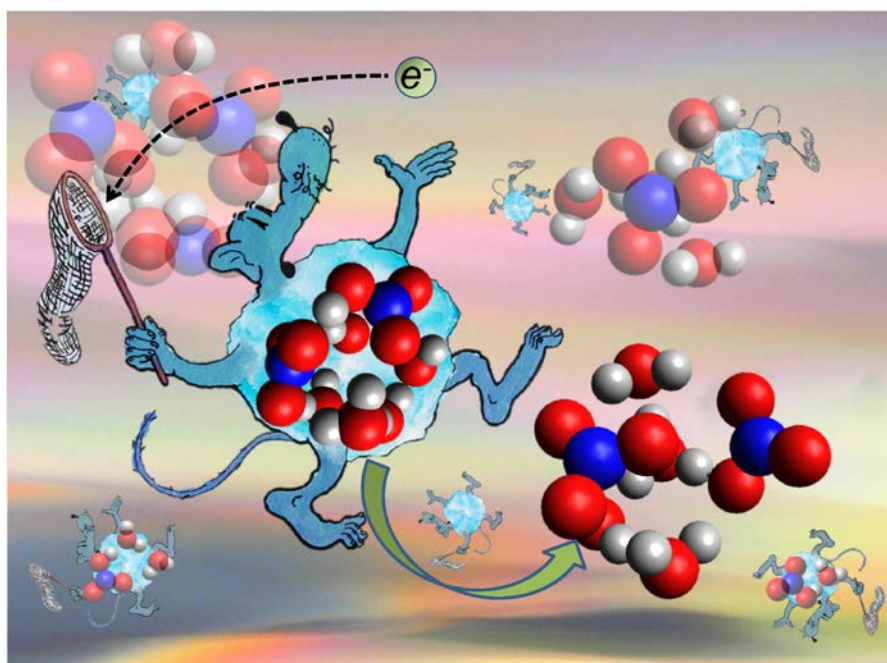
V. Petrak, Z. Vlckova-Zivcova, H. Krysova, O. Frank, A. Zukal, L. Klimsa, J. Kopecek, A. Taylor, L. Kavan, V. Mortet: „Fabrication of porous boron-doped diamond on SiO<sub>2</sub> fiber templates” **Carbon**, 2017, 114, 457-464.

L. Kavan, H. Krysova, P. Janda, H. Tarabkova, Y Saygili, M. Freitag, S.M. Zakeeruddin, A. Hagfeldt, M. Graetzel: „Novel Highly Active Pt/Graphene Catalyst for Cathodes of Cu(II/I) Mediated Dye-Sensitized Solar Cells” **Electrochim. Acta**, 2017, 251, 167-175.

## Oddělení dynamiky molekul a klastrů

Chemie indukovaná volnými elektrony ve smíšených částicích  $\text{HNO}_3/\text{H}_2\text{O}$ 

Stratosférické mraky v polárních oblastech (PSC) představují „chemické továrny“, kde dochází k procesům vedoucím k ničení ozonu. Částice těchto PSC modelujeme v molekulových paprscích  $\text{HNO}_3/\text{H}_2\text{O}$  klastry. Objevili jsme, že centrální roli v chemii nastartované záchytem volných elektronů na těchto klastrech hraje anion  $\text{NO}_3^-$ . To je překvapivé vzhledem k tomu, že záchytem elektronu na  $\text{HNO}_3$  vzniká  $\text{NO}_2^-$ . Rovněž jsme navrhli mechanismus vzniku  $\text{HONO}$  a  $\text{OH}$  radikálů důležitých v atmosférické chemii. Spolupracující subjekt: Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik, Leopold-Franzens-Universität Innsbruck, Rakousko.



**Záchyt elektronů na smíšené  $\text{HNO}_3/\text{H}_2\text{O}$  klastry.** Ilustrace na obálce časopisu, kde byl článek zvolen jako „Hot article PCCP 2017“.

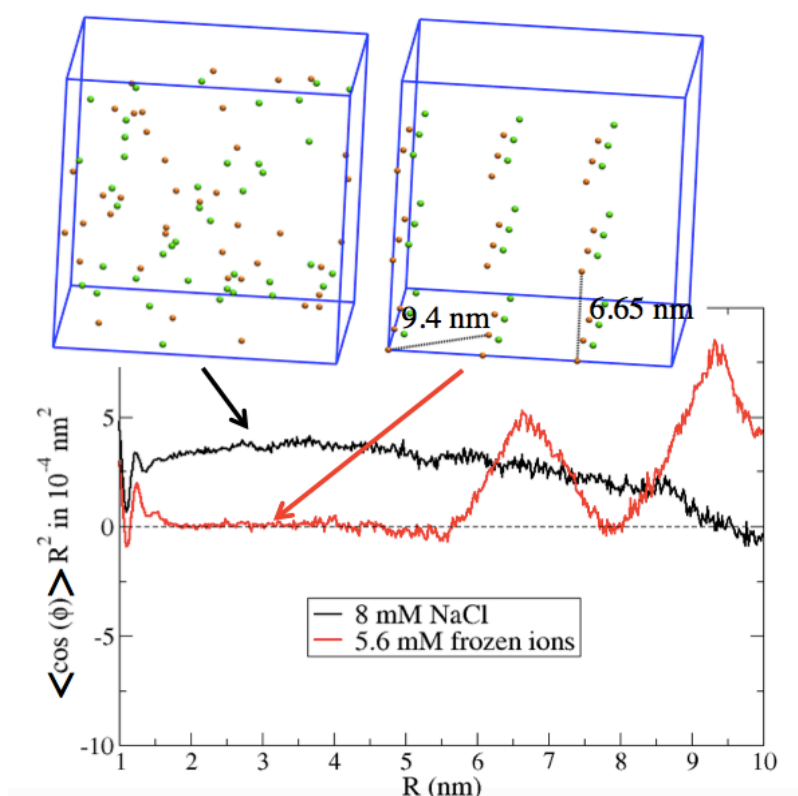
J. Lengyel, M. Ončák, J. Fedor, J. Kočišek, M. K. Beyer and M. Fárník: Electron-triggered chemistry in  $\text{HNO}_3/\text{H}_2\text{O}$  complexes. **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 2017, 19, 11753-11758.



## Oddělení teoretické chemie

**Velikost a původ dalekodosahových korelací orientace molekul vody ve zředěných roztocích solí**

Opakovaně se tvrdí, že dalekodosahové uspořádání vody kolem rozpuštěných látek je klíčem k její biologické funkci. V nedávné studii bylo dokonce uvedeno, že jeden ion ovlivňuje >10000 molekul vody, což bylo interpretováno pomocí “uspořádaných nanodomén”. Naše simulace molekulové dynamiky se správným ošetřením Ewaldovy okrajové podmínky ukázaly, že korelace mezi vzdálenými molekulami vody vznikají především kvůli párům molekul v solvatačních slupkách různých iontů a že odezva vody na přítomnost rozpuštěné látky má lokální charakter. Spolupracující subjekt: École Normale Supérieure Paris, Francie, ÚOCHB AV ČR.



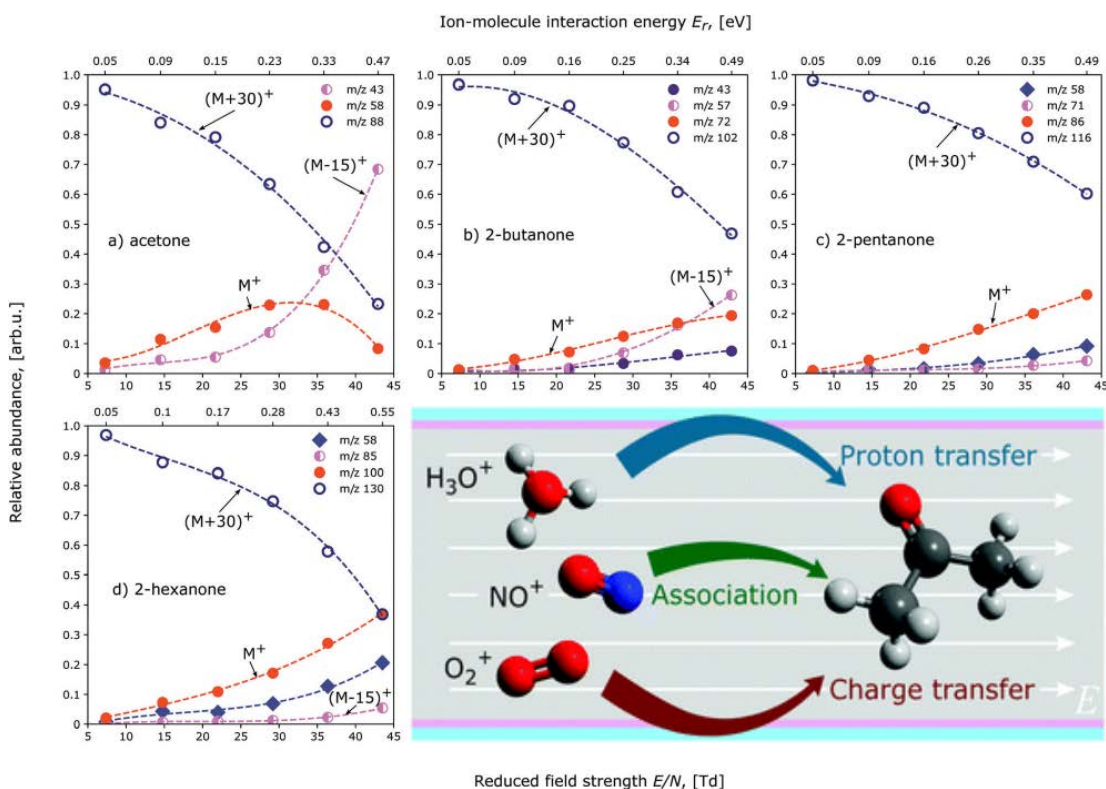
**Vzdáleností vážené orientační korelační funkce dvojic molekul vody.** Snímky uspořádání iontů v 8 mM roztoku NaCl (vlevo) a v 5,6 mM roztoku s ionty pevně umístěnými na pravidelné mřížce (vpravo) a jim příslušející vzdáleností vážené orientační korelační funkce dvojic molekul vody (černá a červená křivka). Ilustrace ukazuje vysokou citlivost dalekodosahové části korelace na uspořádání iontů.

Pluhařová, E.; Laage, D.; Jungwirth, P. Size and Origins of Long-Range Orientational Water Correlations in Dilute Aqueous Salt Solutions. **Journal of Physical Chemistry Letters**, 2017, 8, 2031-2035.

## Oddělení chemie iontů v plynné fázi

**Iontová chemie za zvýšených energií interakcí mezi ionty a molekulami v proudově driftové trubici s vybranými ionty: reakce  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{NO}^+$  a  $\text{O}_2^+$  se saturevanými alifatickými ketony**

Reakce iontů  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{NO}^+$  a  $\text{O}_2^+$  s alifatickými ketony od acetonu po 2-oktanon byly zkoumány v heliu jako srážkovém plynu v iontové proudově-driftové trubici SIFDT s cílem popsat jejich závislost na interakčních energiích mezi ionty a molekulami,  $E_r$  a jejich mechanismy. Výsledky umožňují analýzu a absolutní kvantifikaci stopových množství ketonů a jiných těkavých organických sloučenin ve vzduchu použitím nové metody.



**Grafy zastoupení iontových produktů pro reakce  $\text{NO}^+$  s ketony jako funkce redukované intenzity pole  $E/N$  a interakční energie.** Relativní četnost produktových iontů produktu pozorovaná pro uvedené poměry hmotnosti k náboji  $m/z$  související s molekulovou hmotností ketonu  $M$ .

Anatolii Spesyvyi, David Smith and Patrik Španěl, Ion chemistry at elevated ion-molecule interaction energies in a selected ion flow-drift tube: reactions of  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{NO}^+$  and  $\text{O}_2^+$  with saturated aliphatic ketones, **Phys.Chem.Chem.Phys.** 2017, 19, 31714.

**Nejvýznamnější publikace:**

Výsledky vědy a výzkumu dosažené pracovníky ústavu v roce 2017 byly publikovány ve **160 článcích v mezinárodních impaktovaných časopisech**, a ve **3 kapitolách** v cizojazyčné monografii. Každý měsíc jsou v rubrice News-Important Publications anglických webových stránek ústavu zveřejňovány vybrané publikace. (<http://www.jh-inst.cas.cz/www/detail.php?dokument=132> ).

*Prosinec 2017*

Electron-induced chemistry in microhydrated sulfuric acid clusters , Jozef Lengyel ; Andriy Pysanenko and Michal Farnik Atmospheric Chemistry and Physics, 2017, 17(22), 14171-14180.

Nanoparticles with Embedded Porphyrin Photosensitizers for Photooxidation Reactions and Continuous Oxygen Sensing, Pavel Kubat ; Petr Henke; Veronika Berzediova; Miroslav Štěpánek; Kamil Lang; and Jiří Mosinger, ACS Appl. Mater. Interfaces , 2017, 9 (41), 36229-36238.

*Listopad 2017*

Quantifying protein densities on cell membranes using super-resolution optical fluctuation imaging, Tomáš Lukeš, Daniela Glatzová, Zuzana Kvíčalová, Florian Levet, Aleš Benda, Sebastian Letschert, Markus Sauer, Tomáš Brdička, Theo Lasser and Marek Cebecauer, Nature Communications, 2017, 8, 1731.

Ion chemistry at elevated ion-molecule interaction energies in a selected ion flow-drift tube: reactions of H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>, NO<sup>+</sup> and O<sub>2</sub><sup>+</sup> with saturated aliphatic ketones, Anatolii Spesyvyi, David Smith and Patrik Španěl, Phys. Chem. Chem. Phys., 2017, Advance Article.

*Říjen 2017*

Identification of catalytic sites in cobalt-nitrogen-carbon materials for the oxygen reduction reaction, A.Zitolo, N.Ranjbar-Sahraie, T.Mineva, J.K. Li, S. Stamatina, G.F. Harrington, Lyth S.M., Krtil P., Fonda E., Jaouen F., Nature Communications, 2017, 8, 957.

The origin of methane and biomolecules from a CO<sub>2</sub> cycle on terrestrial planets, Svatopluk Civiš, Antonín Knížek, Ondřej Ivanek, Petr Kubelík, Markéta Zúkalová, Ladislav Kavan and Martin Ferus, Nature Astronomy, 2017, 1, 721-726.

*Září 2017*

Chapter 9-Recent Progress in Dissociative Electron Attachment: From Diatomics to Biomolecules, Ilya I. Fabrikant, Samuel Eden, Nigel J. Mason, Juraj Feror, Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics, 2017, 66, 545-657.

Key steps in unconventional secretion of fibroblast growth factor 2 reconstituted with purified components, Julia P. Steringer, Sascha Lange, Sabína Čujová, Radek Šachl, Chetan Poojari, Fabio Lolicato, Oliver Beutel, Hans-Michael Müller, Sebastian Unger, Ünal Coskun, Alf Honigmann, Ilpo Vattulainen, Martin Hof, Christian Freund, Walter Nickel, eLife, 2017, 6:e28985.

*Srpen 2017*

Baeyer-Villiger Oxidation of Cyclic Ketones by Using Tin-Silica Pillared Catalysts, Jan Přečh, Marta Arroyo Carretero, Jiří Čejka, ChemCatChem., 2017, 9 (15), 3063-3072.

Effect of Enhanced Accessibility of Acid Sites in Micromesoporous Mordenite Zeolites on Hydroisomerization of n-Hexane, Jana Pastvova, Dalibor Kaucky, Jaroslava Moravkova, Jiri Rathousky, Stepan Sklenak, Maryna Vorokhta, Libor Brabec, Radim Pilar, Ivo Jakubec, Edyta Tabor, Petr Klein, and Petr Sazama, *ACS Catalysis*, 2017, 7 (9), 5781-5795.

Effects of the Linking of Cyclopentadienyl and Ketimide Ligands in Titanium Half-Sandwich Olefin Polymerization Catalysts, Vojtech Varga, Miloš Večeřa, Róbert Gyepes, Jiří Pinkas, Michal Horáček, Jan Merna, Martin Lamač, *ChemCatChem*, 2017, 9 (16), 3160-3172 (Picture on Journal Front Cover).

TNU-9 Zeolite: Aluminum Distribution and Extra-Framework Sites of Divalent Cations, Robert Karcz, Jiri Dedecek, Barbara Supronowicz, Haunani M. Thomas, Petr Klein, Edyta Tabor, Petr Sazama, Veronika Pashkova, and Stepan Sklenak, *Chemistry-A European Journal*, 2017, 23 (37), 8857-8870 (Picture on Journal Front Cover).

#### *Červenec 2017*

Tuning Charge Transport Properties of Asymmetric Molecular Junctions, Jakub Šebera, Viliam Kolivoška, Michal Valášek, Jindřich Gasior, Romana Sokolová, Gábor Mészáros, Wenjing Hong, Marcel Mayor, and Magdaléna Hromadová, *The Journal of Physical Chemistry C, J. Phys. Chem. C*, 2017, 121 (23), pp 12885-12894.

Photocatalytic abatement of NO<sub>x</sub> pollutants in the air using commercial functional coating with porous morphology, Radek Zouzelka, Jiri Rathousky, *Applied Catalysis B: Environmental*, 2017, 217, 466-476.

#### *Červen 2017*

Molecular Dynamics Insights into Water-Parylene C Interface: Relevance of Oxygen Plasma Treatment for Biocompatibility, Monika Golda-Cepa, Waldemar Kulig, Lukasz Cwiklik, and Andrzej Kotarba, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2017, 9 (19), 16685-16693.

Two cations, two mechanisms: interactions of sodium and calcium with zwitterionic lipid membranes, Matti Javanainen, Adéla Melcrová, Aniket Magarkar, Piotr Jurkiewicz, Martin Hof, Pavel Jungwirth, and Hector Martinez-Seara, *Chemical Communications*, 2017, 53, 5380-5383.

#### *Květen 2017*

Functionalization of Hydrogenated Chemical Vapour Deposition-Grown Graphene by On-Surface Chemical Reactions, Dr. Karolina Drogowska, Dr. Petr Kovaříček and Dr. Martin Kalbáč, *Chemistry - A European J.*, 2017, 23(17), 4073-4078 (Picture on Journal Front Cover).

Electron-triggered chemistry in HNO<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>O complexes. Jozef Lengyel, Milan Ončák, Juraj Fedor, Jaroslav Kočíšek, Andriy Pysanenko, Martin K. Beyerb and Michal Fárník, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2017, 19, 11753-11758 (Picture on Journal Front Cover).

#### *Duben 2017*

In situ solid-state NMR and XRD studies of the ADOR process and the unusual structure of zeolite IPC-6. Samuel A. Morris, Giulia P. M. Bignami, Yuyang Tian, Marta Navarro, Daniel S. Firth, Jiří Čejka, Paul S. Wheatley, Daniel M. Dawson, Wojciech A. Slawinski, David S. Wragg, Russell E. Morris & Sharon E. Ashbrook, *Nature Chemistry*, 2017.



Formation of nucleobases in a Miller-Urey reducing atmosphere, Martin Ferus, Fabio Pietrucci, Antonino Marco Saitta, Antonín Knížek, Petr Kubelík, Ondřej Ivanek, Violetta Shestivska, and Svatopluk Civiš, PNAS, 2017, 114 (17) 4306-4311.

#### *Březen 2017*

Chelation and stabilization of berkelium in oxidation state +IV. Gauthier J.-P. Deblonde, Manuel Sturzbecher-Hoehne, Peter B. Rupert, Dahlia D. An, Marie-Claire Illy, Corie Y. Ralston, Jiri Brabec, Wibe A. de Jong, Roland K. Strong and Rebecca J. Abergel, Nature Chemistry, 2017, 9 (9), 843-849.

Expansion of the ADOR Strategy for the Synthesis of Zeolites: The Synthesis of IPC-12 from Zeolite UOV (read more in article), Valeryia Kasneryk, Mariya Shamzhy, Maksym Opanasenko, Paul S. Wheatley, Samuel A. Morris, Samantha E. Russell, Alvaro Mayoral, Michal Trachta, Jiří Čejka, and Russell E. Morris, Angew. Chem. 2017, 129, 4388–4391.

#### *Únor 2017*

EDOT polymerization at photolithographically patterned functionalized graphene (read more in article), Petr Kovaříček, Karolina Drogowska, Zuzana Melníková Komínková, Václav Blechta, Zdeněk Bastl, Daniel Gromadzki, Michaela Fridrichová, Martin Kalbáč, Carbon, 2017, 113, 33–39.

Frontier Molecular Orbital Contributions to Chlorination versus Hydroxylation Selectivity in the Non-Heme Iron Halogenase SyrB2 (read more in article), Martin Srnc and Edward I. Solomon, J. Am. Chem. Soc., 2017, 139 (6), 2396–2407.

#### *Leden 2017*

Dipolar Relaxation Dynamics at the Active Site of an ATPase Regulated by Membrane Lateral Pressure (read more in article), Elisabeth Fischermeier, Petr Pospisil, Ahmed Sayed, Martin Hof, Marc Solioz, and Karim Fahmy, Angew. Chem., 2016, 56 (5), 1269–1272,

Electrochemical Oxidation of [1-X-12-I-CB11Me10-] Anions: Formation of Borenium Ylides [12-Dehydro-1-X-CB11Me10] and Iodonium Ylide Anions [{12-(1-X-CB11Me10-)}2I+], Abdul Wahab, Jiří Kaleta, Jin Wen, Michal Valášek, Miroslav Polášek, Josef Michl, and Jiří Ludvík, Inorg. Chem., 2016, 55 (24), 12815–12821.

### III.2 Výzkumné projekty

V roce 2017 ústav řešil 8 výzkumných projektů s podporou zahraničních poskytovatelů a 69 výzkumných projektů finančně podpořených několika různými tuzemskými poskytovateli, v nichž vědci ústavu vystupovali v roli řešitelů/spoluřešitelů či partnerů.:

#### VÝZKUMNÉ PROJEKTY FINANČNĚ PODPOŘENÉ NĚKOLIKA RŮZNÝMI TUZEMSKÝMI POSKYTOVATELI

POSKYTOVATEL	POČET PROJEKTŮ
GA ČR	45
MPO	2
TAČR	3
AV ČR	1
MŠMT	16
jiný	2

#### Významné výzkumné projekty

**From Graphene Hybrid Nanostructures to Green Electronics**, řešitel: M. Kalbáč; projekt programu **ERC-CZ**. Poskytovatel MŠMT.

**Nanomateriály a nanotechnologie pro ochranu životního prostředí a udržitelnou budoucnost** (akronym vědecké infrastruktury - NanoEnviCz), řešitel: Martin Kalbáč, další účastníci projektu: Technická univerzita v Liberci / Ústav pro nanomateriály, pokročilé technologie a inovace; Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem / Přírodovědecká fakulta; Univerzita Palackého v Olomouci / Přírodovědecká fakulta; Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i.; Ústav experimentální medicíny AV ČR, v. v. i.; projekt programu Projekty velkých infrastruktur pro VaVal (2010 - 2019). Poskytovatel MŠMT.

### III. 3. Ocenění

Následující vědečtí pracovníci a studenti byli v roce 2017 oceněni za výsledky své výzkumné činnosti:

**prof. RNDr. Ladislav Kavan, CSc., DSc.** - Cena Františka Běhounka za propagaci a popularizaci české vědy a šíření dobrého jména České republiky v Evropském výzkumném prostoru (ERA), udělilo Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy (MŠMT).

**doc. Mgr. Michal Fárník, Ph.D., DSc** - Praemium Academiae za vědeckou činnost, udělila předsedkyně AV ČR Prof. Eva Zažímalová.

**Mariana Amaro, PhD.** - Prémie Otto Wichterleho za úspěšné splnění mimořádně významného vědeckého úkolu, udělila předsedkyně AV ČR Prof. Eva Zažímalová.

**RNDr. Radek Šachl, Ph.D.** - Prémie Otto Wichterleho za úspěšné splnění mimořádně významného vědeckého úkolu, udělila předsedkyně AV ČR Prof. Eva Zažímalová.

**RNDr. Jaromír Jirkovský, CSc.** - Vizionář 2017 za inovativní aplikace řešení projektu TAČR „Výzkum pro výrobu multifunkčního fotoaktivního nanokompozitu k využití ve stavebnictví a nátěrových hmotách“ společností Pragothem, servis fasád, s.r.o., udělil CzechInno, z.s.p.o.

Ocenění Inženýrské akademie České republiky za vynikající řešení projektu TAČR „Využití fotoaktivních nanopovrchů k řešení aktuálních problémů čištění vzduchu a vody“, udělila Inženýrská akademie České republiky.

**Ing. Jana Kocábová, Ph.D.** - 5. ročník soutěže o Cenu firmy METROHM ČR za nejlepší publikace mladého elektroanalytického chemika do 35 let, udělila firma Metrohm, s.r.o.

**Maksym Opanasenko, Ph.D.** - Neuron Impuls v kategorii do 33 let za projekt: Intelligent design of sustained nanolayered zeolite-polymer composites, udělila Nadace Neuron.

**Vojtěch Laitl** - 10. ročník soutěže Česká Hlavička, druhé místo v soutěži za Automatické zpracování a počítačové modely spekter laserem indukovaného plazmatu, udělila Společnost Česká hlava, s.r.o.

**Pavel Váňa** - Cena Nadačního fondu J. Heyrovského, vítězům a laureátům studentských předmětových a tvůrčích soutěží, udělil Nadační fond Jaroslava Heyrovského.

1. místo (obor Fyzika) v národní soutěži SOČ prací za "Simulace plazmatu meteorů pomocí výkonných laserů: Od laboratorní ablační spektroskopie ke složení meziplanetární hmoty", udělil Národní institut pro další vzdělávání.

**doc. RNDr. Lubomír Pospíšil, CSc.** - Best Poster Award- Nový způsob určení kinetických parametrů v elektrochemii, udělil Organizační výbor mezinárodní konference Electrochemical Impedance Analysis 2017.

*Archiv všech ocenění lze nalézt na stránce ústavu pod odkazem:*

<http://www.jh-inst.cas.cz/www/prize.php?p=111>

### III. 4. Propagace a popularizace

**V roce 2017 ústav průběžně prezentoval výsledky vědecké práce veřejnosti prostřednictvím tiskových zpráv ve spolupráci s agenturou PR Konektor a Odborem mediální komunikace AV ČR**

(<http://www.jh-inst.cas.cz/www/pressrelease.php?p=110>).

Výzkumná činnost vědců ústavu byla v průběhu roku 2017 pravidelně představována veřejnosti prostřednictvím popularizačních článků v denním tisku či časopisech, rozhovorech v rozhlasu a televizi. Vznikly desítky výstupů do médií, z nichž ty nejvýznamnější byly zpracovány a zveřejněny na webových stránkách ústavu (aktuálně v odkazu NEW RESULTS IN MEDIA, např.

<http://www.jh-inst.cas.cz/www/detail.php?dokument=276> a v archivním odkazu MEDIA, slouží k dlouhodobé popularizaci výsledků práce vědců ústavu a v procesu vzdělávání zájemců o přírodní vědy (především v programech pro střední a základní školy).

### Vybrané pořady v České televizi:

**Česká televize - ČT 24. Jak Německo chrání whistleblowery ve vědě? Má to na starost vědecký ombudsman (29.8.2017).** U příležitosti ústavního semináře profesora J. Heberleho natočil štáb redakce Věda ČT 24 rozhovory k danému tématu s přednášejícím a ředitelem ÚFCH JH prof. Martinem Hofem.

**Česká televize - ČT 24. Akademie věd ocenila tři české vědce... (19.9.2017).** Předsedkyně Akademie věd Eva Zažímalová dnes dopoledne předala prestižní ocenění třem špičkovým vědcům. V reportáži, medailóncích a rozhovorech jsou stručně představeni tři letošní ocenění vědci, mezi nimi i Michal Fárník (fyzik) z ÚFCH JH.

**Česká televize - ČT24, Studio 6 (3.10.2017).** Rozhovor na téma Jak zjistit přítomnost života ve vesmíru s profesorem Svatoplukem Civišem o výzkumu jeho týmu, jehož výsledky byly uveřejněny časopisem Nature Astronomy.

**Česká televize - ČT24, Studio 6 - Ocenění pro talentované studenty (14.12.2017).** V raním Studiu 6 byla mezi pozvanými hosty vysílání k odpolednímu předávání Cen NF JH 2017 i K. Stejskalová z ÚFCH JH, místopředsedkyně správní rady NF JH. Hosté v rozhovorech společně přiblížili práci s talentovanými studenty, představili letošní oceněné a činnost NF JH, který se nadaným žákům v přírodních vědách věnuje od r. 1993.

**Česká televize, Studio ČT 24 (21.12.2017). Téma: Čeští vědci vylepšili výkonný mikroskop; host: Marek Cebecauer.** Vědci z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského Akademie věd ČR v Praze vylepšili možnosti fluorescenční superrozlišovací mikroskopie.

### Popularizační programy pro zájemce o přírodní vědy:

**V roce 2017 uspořádal ústav 90 popularizačních a vzdělávacích akcí/programů pro studenty VŠ, žáky SŠ a ZŠ, předškoláky MŠ a zájemce z široké veřejnosti, které navštívilo celkem 7830 návštěvníků.**

Podrobný harmonogram programů roku 2017 pod názvem *Magie chemie 2017* je archivován ve webové aplikaci popularizačního projektu Tři nástroje s adresou

<http://www.jh-inst.cas.cz/3nastroje/detail.php?p=46>.

### Přehled nejvýznamnějších popularizačně-vzdělávacích programů a akcí:

V rámci celoakademického festivalu Týden vědy a techniky AV ČR 2017 proběhlo 12 různých popularizačních programů včetně Dne otevřených dveří (10. 11. 2017): Celkem programy navštívilo 580 návštěvníků.

Putovní výstava věnovaná J. Heyrovskému a jeho výzkumu v oboru polarografie s názvem *Příběh kapky* v roce 2017 pokračovala třemi novými výstavami: v Liberci, Litoměřicích a v Praze. Virtuální podoba výstavy, která trvá od roku 2009, a za celou dobu jejího trvání ji navštívilo přes 26 000 návštěvníků, je aktualizována na její webové stránce s adresou <http://www.jh-inst.cas.cz/heyrovsky>).

Tým popularizátorů PEXED ÚFCH JH se již potřetí účastnil Veletrhu vědy pořádaného v Letňanech týmem projektu Otevřená věda AV ČR (8.-10.6.2017) s programem svého stánku "Věda není nuda" (chemické experimentování pro žáky ZŠ a SŠ a veřejnost). Stánkem prošlo za tři dny okolo 1 500 zájemců.

Pro žáky a pedagogy středních škol pokračoval program workshopů, praktických měření či popularizačních přednášek a exkursí. Žáci ze základních či mateřských škol z celé ČR absolvovali workshopy *Chemie není nuda* (2. stupeň ZŠ) nebo chemická divadla představujících chemii a profesi vědce pod názvem *Posviť si citronem na duhu* (1. stupeň ZŠ a předškoláci MŠ).

Ústav se na dva roky zapojil do 2 projektů Šablony SŠ v programu OP VVV MŠMT řešených MSŠCH z Prahy 1 a BiGy ze Žďáru nad Sázavou a svými výukovými bloky obohacuje a zpestřuje výuku v chemii a fyzice.

Zájemcům z veřejnosti byl věnován program sobotních workshopů (1x měsíčně) pod názvem *Cesta za nobelovkou- díl II*. 37 dětí ve věku 5-15 let mělo možnost seznámit se s chemií a fyzikou prostřednictvím experimentování v laboratoři.

29 středoškoláků ze 17 škol z celé ČR navštívilo tradiční srpnovou školu (21. - 25. 8. 2017), která byla již podruhé podpořena projektem MŠMT v programu Podpory nadaných žáků SŠ a ZŠ (projekt 0010/7/NAD/2017 "NANOŠKOLA 2017 - letní odborná škola výzkumného ústavu pro nadané středoškoláky").

Celoroční stáže v projektu *Otevřená věda AV ČR 2017* v ústavu absolvovalo 5 středoškoláků. Další tři desítky středoškoláků docházely do ústavu na své mimoškolní stáže (v projektu *Tři nástroje*), či zde studenti vykonali odborné praxe (studenti MSŠCH z Prahy 1 či SPŠCH z Ostravy).

Galerie 4P zapůjčila či uspořádala 4 výstavy: NANORMÁLNÍ svět, Otto Wichterle: vědec a vynálezce, Po zeleném ostrově na modrém kole, Věda a umění/umění a věda - díl.I. Před vánoci také proběhl již 13. ročník výstavy amatérských uměleckých prací vědců z ÚFCH JH s názvem *Nejen prací živ je vědec*.

Ústav byl spoluorganizátorem předávání *Cen Nadačního fondu Jaroslava Heyrovského* 11 talentovaným SŠ studentům z celé ČR (vítězové předmětových olympiád a vybraní vítězové SOČ oborů).

### III. 5. Vědecká a pedagogická spolupráce pracoviště s vysokými školami

Ústav se v roce 2017 podílel na školení **49 doktorandů** (v presenční a kombinované formě studia; z tohoto počtu v průběhu roku 2017 obhájilo disertační práci 6 studentů); **32 vysokoškolských studentů** (bakaláři, magistři, diplomanti) bylo školeny vědci z ústavu v rámci svých bakalářských a diplomových prací.

Školení studenti každoročně prezentují výsledky svých stáží (bakalářské, diplomové práce, disertační práce) na studentské konferenci nazvané **Seminář studentů ÚFCH JH**. Konference se v roce 2017 uskutečnila v konferenčním centru AV ČR v zámku Liblice (9.- 10. 5. 2017). Svě prezentace, převážně v anglickém jazyce, předneslo 25 VŠ studentů (z toho 9 zahraničních). Konference se dále v roli posluchačů zúčastnila dvacítko vědců ústavu. Studentské příspěvky shrnuje sborník abstraktů

[http://www.jh-inst.cas.cz/www/meeting.php?stav=view\\_detail&kod=190](http://www.jh-inst.cas.cz/www/meeting.php?stav=view_detail&kod=190).



Na **výuce** studentů bakalářského, magisterského a DSP studia (postgraduální studenti) se **na desítku vysokých škol** podílely tři desítky vědeckých a odborných pracovníků ústavu a v průběhu *letního/zimního* semestru bylo celkem odpřednášeno *661/1191* hodin v *19/45* semestrálních cyklech přednášek, seminářů a cvičení.

15 vědeckých pracovníků bylo v roce 2017 členy oborových rad doktorského studia a 15 vědeckých pracovníků bylo členy komisí pro státní bakalářské, závěrečné a rigorózní zkoušky v oboru fyzikální chemie a obhajoby disertačních prací na několika univerzitách a vysokých školách (PřF UK v Praze, ČVUT v Praze, VŠCHT v Praze, Univerzita Pardubice, Masarykova Univerzita v Brně, Palackého Univerzita v Olomouci, Jihočeské Univerzita v Českých Budějovicích).

Pracovníci ústavu v roce 2017 úspěšně spolupracovali na řešení **18 grantových projektů společně s vysokými školami** v roli řešitelů/spoluřešitelů grantových projektů.

Další vzdělávací a současně popularizační činností, které se ústav od roku 2005 věnuje intenzivně nad rámec každodenní badatelské činnosti, je vzdělávání **středoškolské mládeže** a práce s talentovanými SŠ studenty, kteří se zajímají o studium přírodních věd (přednášky, exkurse, workshopy, stáže a praxe). Pro středoškolskou mládež bylo v roce 2017 předneseno celkem 84 hodinových přednášek na různá témata z oboru fyzikální chemie. Studenti, kteří středoškolské stáže vykonali v ústavu, své práce obhajovali v různých soutěžích, např. SOČ či Amavet, školní ročníkové či maturitní práce.

V roce 2017 ústav rovněž pokračoval v programech zaměřených na **vzdělávání žáků základních škol** (výuka experimentováním, workshopy) a **předškoláků z mateřských škol** (chemické divadlo). Ústav již takto spolupracuje s více než stovkou škol (SŠ, ZŠ a MŠ) z regionů ČR, včetně Prahy. Při vzdělávání mládeže ústav pravidelně spolupracuje např. také s Odborem projektů a grantů AV ČR (projekt *Otevřená věda AV ČR 2017*), Národním institutem dalšího vzdělávání MŠMT (programy vzdělávacích návštěv ústavu *Den (s) vědcem*), s Nadačním fondem Jaroslava Heyrovského (*soutěže SOČ*) či Goethe Institutem v Praze (soutěž *Bystré hlavy*). Popularizaci výsledků VaV se věnují pravidelně aktualizované stránky s adresou <http://www.jh-inst.cas.cz/3nastroje> či <http://www.jh-inst.cas.cz/heyrovsky>.



**Vzdělávací programy:** *Praktika v laboratořích a stáže v týmech, chemické představení pro děti MŠ (obrázek vlevo), workshopy pro žáky ZŠ nebo SŠ, letní škola pro talentované středoškoláky z celé ČR (obrázek vpravo).*

### III. 6. Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou

#### Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané řešením projektů

##### **Syntéza a optimalizace materiálů katody a anody pro 48 V Li akumulátor pro automobilový průmysl**

Nová syntéza materiálů na bázi  $\text{TiO}_2$  a ternárních oxidů s vysokou kapacitou i rychlostí nabíjení pro lithiové baterie. Identifikace klíčových parametrů syntézy katodového materiálu NMC umožňující reprodukovatelnou přípravu materiálu v poloprovozním měřítku. Optimalizace koncentrace vodivých aditiv v NMC.

Uplatnění výsledku: prezentace na 2 mezinárodních konferencích 1. M. Zukalová: Facilitated Li insertion into  $\text{TiO}_2$  based ternary oxides for battery application, CEWEG 2017, Ženeva, Švýcarsko 2. M. Zukalová: Low-temperature solid state synthesis of  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  with improved electrochemical performance for applications in Li-ion batteries, BIT's 7th Annual World Congress of Nano Science & Technology-2017, Fukuoka, Japonsko

Název projektu/programu: Výzkum a návrh konstrukce 48V lithiových akumulátorů pro automobilový průmysl/program TRIO

Poskytovatel: Ministerstvo průmyslu a obchodu České republiky

Partnerská organizace: **HE3DA, s.r.o.**

M. Zukalova et al. „Li insertion into  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  spinel prepared by low temperature solid state route: Charge capability vs surface area“ *Electrochim. Acta*, 2018, 265, 480-487.

##### **Fotokatalytická povrchová úprava se samočisticí a desinfekční funkcí**

Byl vyvinut transparentní nanokompozitní nátěr s fotokatalytickou samočisticí a desinfekční funkcí, určený k povrchovému ošetření nových i renovovaných pláštů budov, včetně historických objektů. Pod obchodním názvem BALCLEAN ho vyrábí společnost Barvy a Laky Teluria, s. r. o., která za něj získala čestné uznání v soutěži o Cenu Inovace roku.

Uplatnění výsledku: Za inovativní způsob aplikace systému BALCLEAN na zateplené pláště panelových domů jako prevence růstu řas získala společnost Pragotherm, servis fasád, s.r.o., ocenění Vizionář 2017.

Název projektu/programu: Výzkum pro výrobu multifunkčního fotoaktivního nanokompozitu k využití ve stavebnictví a nátěrových hmotách

Poskytovatel: TAČR

Partnerská organizace: **Centrum pro nanotechnologie Technické University v Liberci, Ústav anorganické chemie AV ČR, Barvy a Laky Teluria, s. r. o. a Denas Color, a. s.**

### **Stanovení biomarkerů bakteriálních infekcí v dechu pacientů s cystickou fibrózou pomocí kvantitativních analýz těkavých látek ve vydechaném vzduchu a headspace sputa a bakteriálních kultur.**

Neinvazivní metoda pro diagnostiku a sledování bakteriální infekce u pacientů s cystickou fibrózou (CF) založená na těkavých biomarkerech v dechu. Stopová množství těkavých látek v dechu pacientů s CF byla určena pomocí hmotnostní spektrometrie v proudové trubici s vybranými ionty (SIFT-MS) a plynové chromatografie s hmotnostní spektrometrií (GC-MS). Byla vytvořena metodika odběru vzorku pomocí termálně desorpčních trubiček pro off-line analýzy a nalezeny biomarkery bakteriálních infekcí v dechu pacientů s cystickou fibrózou pomocí kvantitativních analýz těkavých látek ve vydechaném vzduchu a headspace sputa a bakteriálních kultur.

Uplatnění výsledku: Acetic acid is elevated in the exhaled breath of cystic fibrosis patients.

Název projektu/programu: Hmotnostně spektrometrická kvantifikace těkavých metabolitů v dechu pacientů s cystickou fibrózou pro neinvazivní diagnostiku bakteriálních infekcí

Poskytovatel: GAČR

Partnerská organizace: **Fakultní nemocnice v Motole.**

Španěl, Patrik; Sovová, Kristýna; Dryahina, Kseniya; Doušová, T.; Dřevínek, P.; Smith, D. Acetic acid is elevated in the exhaled breath of cystic fibrosis patients. **Journal of Cystic Fibrosis**, 2017, 16(5), e17-e18.

### **Společné projekty výzkumu a vývoje podpořené z veřejných prostředků:**

V roce 2017 byl udělen jeden patent v ČR, podány dvě patentové přihlášky v ČR a jedna mezinárodní.

#### **Způsob výroby zeolitu ZSM-5 s vysokým podílem párů atomů hliníku**

Číslo přihlášky: 2016-150 Číslo dokumentu: 306852

**Datum udělení patentu:** 28.06.2017

Původce: Věnceslava Tokarová, Stanislava Stiborová, Pavel Bělecký, Jiří Dědeček, Veronika Pashková

Způsob výroby zeolitu ZSM-5 s vysokým podílem párů atomů hliníku ve skeletu spočívá v tom, že se nejprve připraví aluminosilikátový gel smícháním roztoku obsahujícího 0,4 až 1,6 hmotnostních dílů chloridu nebo dusičnanu hlinitého, 2 až 6 hmotnostních dílů tetraethylorthosilikátu a 2 až 3 hmotnostní díly ethanolu s vodným roztokem obsahujícím 4 až 5 hmotnostních dílů 40 % hmotn. roztoku tetrapropylamoniumhydroxidu a 14 až 16 hmotnostních dílů vody, který se homogenizuje po dobu 80 až 100 min, pak se smíchá se směsí připravenou smícháním roztoku obsahujícího 5 až 42 hmotnostních dílů tetraethylorthosilikátu, 4 až 6 hmotnostních dílů vody a 2 až 3 hmotnostní díly ethanolu s roztokem obsahujícím 4 až 38 hmotnostních dílů 40 % hmotn. roztoku tetrapropylamoniumhydroxidu a 40 až 46



hmotnostních dílů vody za vzniku reakční směsi, která se převede do autoklávu, kde proběhne hydrotermální syntéza při teplotě 160 až 170 °C za míchání po dobu 5 až 7 dní.

### **Katalyzátor pro hydroizomerizaci alkanů C4-C7, jeho příprava a použití**

Číslo přihlášky: 2017-6, **Datum přihlášení:** 09.01.2017

Původce: Petr Sazama Ing., Ph.D., Jaroslava Morávková Ing., Ph.D., Jana Pastvová Ing., Dalibor Kaucký Ing., Ph.D., Praha 9 - Střížkov, CZ

Způsob přípravy katalyzátoru pro hydroizomerizaci alkanů C4-C7 na bázi mordenitu, tímto způsobem připravitelný katalyzátor s vyšší aktivitou díky zpřístupnění reakčních center bez snížení počtu kyselých reakčních center, a způsob hydroizomerizace alkanů na tomto katalyzátoru. Způsob přípravy katalyzátoru pro hydroizomerizace alkanů C4-C7 zahrnuje následující kroky:

- fluoridace mordenitu vodorozpustným fluoridem nebo kyselinou fluorovodíkovou,
- následná desilikace mordenitu alkalickým loužením za vzniku modifikovaného mordenitu,
- iontová výměna atomů sodíku za protony v roztoku obsahujícím H<sup>+</sup> nebo NH<sub>4</sub><sup>+</sup> ionty a případnou následnou kalcinací, za tvorby H-formy modifikovaného mordenitu,
- nanesením alespoň jednoho kovu vybraného ze skupiny sestávající z ruthenia, rhodia, palladia, osmia, iridia a platiny na modifikovaný mordenit v NH<sub>4</sub><sup>+</sup>- nebo H-formě.

### **Způsob výroby katalyzátorů perovskitové struktury, katalyzátory perovskitové struktury a jejich použití pro vysokoteplotní rozklad N<sub>2</sub>O**

Číslo přihlášky: 2017-50 **Datum přihlášení:** 30.01.2017

Původce: Galina Sádovská Ing., Ph.D., Pardubice, Petr Sazama Ing., Ph.D., Praha 2

Způsob výroby katalyzátorů perovskitové struktury pro vysokoteplotní rozklad N<sub>2</sub>O, které mají obecný vzorec A<sub>1-x</sub>B<sub>x</sub>C<sub>y</sub>D<sub>1-y</sub>O<sub>3-δ</sub> a kde A a B jsou vybrané ze skupiny sestávající z lanthanoidů, kovů alkalických zemin, kovů skupiny III.A a IV.A, přechodných kovů skupiny I.B až IV.B, VI.B, VIII.B a Bi; C a D jsou vybrané ze skupiny sestávající z přechodných kovů skupiny IV.B až VIII.B, lanthanoidů, Sn, Al a Sb; x a y jsou nezávislá čísla v rozmezí od 0 do 1 a δ je číslo určující nestechiometrii kyslíku nabývající hodnot v rozmezí od -0,1 do 0,5; který zahrnuje kroky míchání pevné fáze vodorozpustných solí kationtů A, B, C, a D s vodorozpustnou solí aniontu vybraného ze skupiny zahrnující uhličitan, hydrogenuhličitan, šťavelan, síran, metafosforečnan, fosforečnan, hydroxid, dusitan, chroman a dichroman; homogenizace; přidání surfaktantu; míchání; filtrace suspenze, její sušení a kalcinace. Katalyzátory perovskitové struktury a jejich použití pro vysokoteplotní rozklad N<sub>2</sub>O.

### **Výsledky spolupráce se státní a veřejnou správou**

Výsledek: Užití, likvidace, budoucnost rtuti v ČR (Minamatská úmluva, skladování rtuti, povolené a zakázané formy rtuti apod.)

Uplatnění: Ministerstvo životního prostředí ČR

Zadavatel: Poradenství pro Ministerstvo životního prostředí ČR, ministerský rada Michaela Vytopylová, PhD.

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

Název expertizy: Činnost pro expertní panel RVVI - EP9 chemické vědy

Zadavatel: Vláda ČR

Popis výsledku: Hodnocení vědeckých výstupů VaV organizací v ČR.

### Informace o zaměstnancích pracoviště, kteří zastávali funkce v řídicích orgánech významných mezinárodních vědeckých organizací

**Magdaléna Hromadová, PhD.** Název organizace: International Society of Electrochemistry Funkce: Officer of Division 6 (Molecular Electrochemistry). Funkční období: 2017-2019

**doc. Ing. Petr Krtil, CSc.** Název organizace: International Society of Electrochemistry Funkce: Scientific Meeting Committee. Funkční období: Chair 2017.

**RNDr. Jan Hrušák, CSc.** Název organizace: Mezinárodní organizace Evropské strategické fórum pro výzkumné infrastruktury (ESFRI) Funkce: Místopředseda, funkční období: 2016-2018.

### III. 7. Hospodářské smlouvy

Ústav v roce 2017 pokračoval v plnění závazků **9 hospodářských smluv o dílo** (tuzemské a zahraniční podnikatelské a jiné subjekty). V rámci plnění těchto smluv byly dosaženy výsledky, převážně předané ve formě výzkumných zpráv.

#### Nejvýznamnější výsledky:

#### **Elektrochemický výzkum 3D Li baterie obsahující nanomateriály**

Byla provedena pilotní studie zahrnující testování NMC materiálu v poločlátku i swagelok-člátku, na jejímž základě HE3DA vytvořila a patentovala unikátní technologickou platformu výroby lithiových akumulátorů na bázi trojrozměrných elektrod (3D). Na základě této existující platformy byl společnosti HE3DA, s.r.o. a Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského přidělena v letošním roce dotace na řešení projektu Výzkum a návrh konstrukce 48V lithiových akumulátorů pro automobilový průmysl v rámci programu TRIO Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky

Zadavatel: HE3DA, s.r.o.

Uplatnění: Vývoj nových typů Li-ion baterií

#### **Využití fotokatalytického procesu při čištění vzduchu**

Byla provedena kvantifikace rychlosti odstraňování oxidů dusíku z proudu vzduchu pomocí fotokatalytické barvy obsahující oxid titaničitý, která byla nanesena na povrch stavebních materiálů.

Zadavatel: Advanced Materials – JTJ s.r.o.

Uplatnění: Využití fotokatalytického procesu při čištění vzduchu., kdy fotokatalytická barva obsahující oxid titaničitý byla nanesena na povrch stavebních materiálů.

Radek Zouzelka, Jiri Rathousky : Photocatalytic abatement of NO<sub>x</sub> pollutants in the air using commercial functional coating with porous morphology, *EApplied Catalysis B: Environmental*, 2017, 217, 466–476

### **Prostředky pro komplexní konzervaci historických materiálů**

Nové metody pro konzervaci historických materiálů vyvinuté v ÚFCH JH jsou testovány spolupracující firmou a připravovány ke komerčnímu využití.

Zadavatel: AQUA obnova staveb s.r.o.

Uplatnění: Komplexní konzervace historických objektů, které jsou součástí našeho kulturního dědictví.

Spolupráce na základě patentu: Hydrofobizace pískovcových a vápencových materiálů s tenkou hydrofilní povrchovou vrstvou (Hydrophobization of sandstone and calcareous materials with a thin hydrophilic surface layer), Památkový postup (Certified method). Osvědčení vydáno Ministerstvem kultury ČR (2015) (Ministry of Culture of the Czech Republic).

Spolupráce na základě patentu: Čistící směs pro odstraňování hydrofobizačních ochranných povlaků (Cleaning mixture for the removal of hydrophobization protective coatings). Patent CZ 305527 (2013).

Spolupráce na základě patentu: Směs pro odstraňování polymerních hydrofobizačních povlaků (Cleaning mixture for the removal of polymeric hydrophobization coatings). Patent CZ 305528 (2013).

### **Metoda pro selektivní odstraňování malířského laku a přemaleb z obrazů**

Metoda pro selektivní odstraňování malířského laku a přemaleb z obrazů

Zadavatel: akad. malíř Igor Fogaš, Moravská galerie Brno

Uplatnění: Konzervátor úspěšně testoval nové čistící gely vyvinuté v ÚFCH JH

Smlouva na základě patentu: Čistící směs pro odstraňování povlaků terpenoidních pryskyřic (Cleaning mixtures for the removal of coatings of terpenoid resins), Patent CZ 305 490 (2013).

### **Metoda pro selektivní odstraňování malířského laku a přemaleb z obrazů**

Metoda pro selektivní odstraňování malířského laku a přemaleb z obrazů

Zadavatel: akad. malíř Jiří Látal, Litomyšl

Uplatnění: Konzervátor úspěšně testoval nové čistící gely vyvinuté v ÚFCH JH při restaurování barokní olejomalby (18. stol.)

Smlouva na základě patentu: Čistící směs pro odstraňování povlaků terpenoidních pryskyřic (Cleaning mixtures for the removal of coatings of terpenoid resins), Patent CZ 305 490 (2013).

### **Sada účinných průřezů pro srážky elektronu s plynem Novec 4710**

Novec 4710 registrovaná značka společnosti 3M je považovaný za nejperspektivnější plyn, který by se mohl používat jako náhrada za SF<sub>6</sub> ve vysokonapěťových rozvaděčích. Na základě hospodářské smlouvy s firmou Eaton jsme změřili sadu účinných průřezů pro srážky elektronu s tímto plynem.

Zadavatel: Eaton European Innovation Center, Roztoky

Uplatnění: Účinné průřezy budou použity při počítačovém návrhu vysokonapěťových spínačů a rozvaděčů naplněných tímto plynem

### **Hodnocení nanomorfologie povrchu korozní vrstvy Zr-slitin povlakových trubek pro palivové články metodou AFM**

Hodnocení kvality povrchu trubek pro palivové články vystavených různému koroznímu prostředí

Zadavatel: UJP PRAHA a.s.

Uplatnění: Posouzení odolnosti povrchu palivových trubek ze slitin zirkonu vůči koroznímu prostředí

### **XPS analýza vzorků práškové celulózy**

Metodou XPS byla charakterizována povrchová vrstva vzorků práškové celulózy.

Zadavatel: Zemědělská fakulta, Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích

Uplatnění: Zadavateli byla předána písemná zpráva s výsledky.

### **Objasnění role chromanových aditiv v procesu výroby chlorečnanů**

V rámci spolupráce byla analyzována role chromanů na účinnost anodického procesu výroby chlorečnanů. Chromany představují klíčové aditivum, které umožňuje rentabilitu průmyslové výroby chlorečnanů (3 mil. tun/rok). Průmyslové použití chromanů vzhledem k jejich karcinogenním účinkům chromanů je od roku 2020 v EU zakázáno. Chromany ovlivňují selektivitu povrchu anody vzhledem ke konkurenčním reakcím vylučování kyslíku a chlóru. Výsledný efekt je však poměrně malý a lze se domnívat, že hlavní efekt chromanů je v katodické části procesu.

Zadavatel: AkzoNobel Pulp and Performance Chemicals S.A.

Uplatnění: Optimalizace výroby chlorečnanů

### III. 8. Mezinárodní vědecká spolupráce

V rámci mezinárodní spolupráce pracoviště řešilo celkem 8 projektů financovaných Evropskou komisí v rámci 7.RP (1 projekt), programu Horizont 2020 (6 projektů), 1projekt financovaný agenturou EDA

#### Projekty financované Evropskou komisí v programu 7.RP a HORIZONT 2020:

**CAScade deoxygenation process using tailored nanoCATalysts for the production of BiofuELs from lignocellulosic biomass**, (acronym CASCATBEL), koordinátor: IMDEA Energy, Spain, řešitel: J. Čejka. Projekt byl zahájen v roce 2013 a pokračoval v řešení do roku 2017.

**Maximizing the EU shale gas potential by minimizing its environmental footprint** (akronym: ShaleXenvironment), koordinátor: University College London, UK; řešitel: J. Čejka. Projekt byl zahájen v roce 2015 a pokračuje v řešení do roku 2018.

**Graphene-Based Revolution in ICT and Beyond**, (akronym GRAPHENE), koordinátor: Chalmers Tekniska Hogskola AB, Sweden, řešitel: L. Kavan. Projekt byl zahájen v roce 2016 a pokračuje v řešení do roku 2018.

**New methods for new materials** (akronym NEW4NEW); koordinátor: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského (Česká republika), řešitel: Š. Sklenák. Projekt byl zahájen v roce 2015 a pokračuje v řešení do roku 2017.

**Trans-Spin NanoArchitectures: from birth to functionalities in magnetic field** (akronym TSuNAMI), Koordinátor: Karlova Univerzita v Praze, řešitel: RNDr. Ing. Kalbáč Martin, Ph. D., Projekt byl zahájen 2017 a pokračuje v řešení do roku 2022

**Electrochemical Conversion of Renewable Electricity into Fuels and Chemicals** (Akronym: ELCOREL), Koordinátor: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského (Česká republika), řešitel: doc. Ing. Petr Krtil, CSc. Projekt byl zahájen v roce 2017 a pokračuje v řešení do roku 2021.

**Ion-Molecule Processes for Analytical Chemistry Technologies**, (akronym IMPACT), koordinátor: University of Birmingham, řešitel: P. Španěl. Projekt byl zahájen v roce 2016 a pokračuje v řešení do roku 2020.

#### Projekt financovaný agenturou EDA:

**Next generation personal protection garments against warfare agents** (akronym: PRO SAFE), Koordinátor: AITEC Spain, řešitel: J. Čejka, projekt byl zahájen v roce 2014 a pokračoval v řešení do 2017.

### III.9. Konference a zahraniční hosté

V roce 2017 ústav organizoval či spoluorganizoval **11 konferencí s mezinárodní účastí**, kterých se účastnilo 916 hostů z toho 399 cizinců a **5 konferencí na národní úrovni, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spolupořadatel** s celkovou účastí 253 účastníků.

#### Konference s mezinárodní účastí:

**Jednání řídicího výboru EERA AMPEA a workshop “Foto a elektro- katalýza v konverzi energie“**

20.-21.11.2017. Počet účastníků: 49 z toho ze zahraničí: 44

#### **49. Symposium on Catalysis**

6. – 7. 11. 2017. Počet účastníků: 116 z toho ze zahraničí: 13.

#### **37. Moderní Elektrochemické Metody**

15. 5. -19. 5. 2017. Počet účastníků: 82 z toho ze zahraničí: 12.

#### **Česko – Italsko - Španělské Symposium o katalýze**

1.-5.9.2017. Počet účastníků: 63 z toho ze zahraničí: 36

#### **Workshop o Vrstevnatých Materiálech**

13.-17.6.2017. Počet účastníků: 88 z toho ze zahraničí: 22.

#### **Regionální InRoad Workshop v ČR – Role strukturálních fondů**

8.-9.11. 2017. Počet účastníků: 62 z toho ze zahraničí: 22.

#### **Sedmá konference o elementárních procesech v atomových systémech**

3.-6.9.2017. Počet účastníků: 40 z toho ze zahraničí: 30

#### **50. Heyrovského diskuse: Molekulární elektrochemie v organickém a organometalickém výzkumu**

18.-22. 6. 2017. Počet účastníků: 52 z toho ze zahraničí: 38

#### **3rd General Meeting and Workshop on SECs in Industry of SMARTCATs Action-COST project**

25 – 27.10., 2017. Počet účastníků: 110 z toho ze zahraničí: 90

#### **18. ročník školy hmotnostní spektrometrie**

10. – 15.9. 2017. Počet účastníků: 180 z toho ze zahraničí 30

#### **4th XLIC General Meeting**

14.-16. 3., 2017. Počet účastníků: 74 z toho ze zahraničí: 62

**Významné vědecké akce na národní úrovni, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spoluorganizátor:**

**Prague Membrane Discussions 2017 – Spring Event**

9.3. 2017. Počet účastníků: 73

**3rd Alzheimer Disease Consortium Meeting**

10.11. 2017. Počet účastníků: 36

**Odpoledne s elektrochemií**

11. 12. 2017. Počet účastníků: 78

**Heyrovský Memorial Lecture**

12. 12. 2017. Počet účastníků: 46

**Na hranici Země a vesmíru**

7.-8. 10., 2017. Počet účastníků: 20



### Zahraníční hosté ústavu:

V roce 2017 ústav navštívilo **více než třicet zahraničních hostů**; 24 z nich předneslo v rámci seminářů oddělení své přednášky.

Mezi významnými hosty byl **Prof. Frank Neese** z Max-Planck Institute for Chemical Energy Conversion, který přednesl 27. **Brdičkovu přednášku** na téma „Analysis of complex catalytic mechanisms by High-level spectroscopy and quantum chemistry: The case of water oxidation in PSII“

Další významnou přednášku přednesl profesor **Joachim Heberle** (Freie Universität Berlin, Germany), který je jedním ze čtyř ombudsmanů nezávislých na etických komisích univerzit a výzkumných ústavů v Německu, na téma The German Research Ombudsman: An Instrument Dealing with Scientific Misconduct.



**Prof. Frank Neese**

*Max-Planck Institute for Chemical Energy Conversion, Mülheim, Germany*



**Prof. Joachim Heberle**

*Freie Universität Berlin, Germany*

Mezi dalšími významnými hosty byl profesor **Marc W. Tobias** (Lead Attorney and President at Investigative Law Office, Sioux Falls, SD, USA), který je uznáván jako jeden z nejvýznamnějších bezpečnostních odborníků. Jako zámkový znalec prokázal zranitelnosti bezpečnostních zamykacích systémů mnoha společností, který se výrobou těchto systémů zabývá. V ÚFCH JH přednesl ústavní seminář na téma *3D Printing Technology: The Security of Mechanical Keys*.



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

Vedle své hlavní činnosti ústav v roce 2017 pronajímal nebytové prostory v budově areálové jídelny a v hlavní budově následujícím firmám:

## PRONÁJEM NEBYTOVÝCH PROSTOR

NÁJEMCE	IČO
HE3DA s.r.o.	28949935
Advanced Materials - JTJ s. r. o.	26763842
Ústav termomechaniky AV ČR, v.v.i.	61388998
FN-NANO s.r.o.	05079233
GODS, s.r.o.	45787956
Dana Kapková Dekolab-sklo	69482292
Ivan Černý	42531772
Lukáš Svoboda	70752648
Zdeňka Beranová	41798473
IVR FS s.r.o.	24277169
LAGET, spol. s r.o.	15030091

Kromě toho ústav příležitostně pronajímal své zasedací místnosti vč. techniky. Svým zaměstnancům a zahraničním hostům ústav zajišťoval v případě potřeby ubytování. Další činnost ústav neprováděl.

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

V roce 2017 provedl Finanční úřad pro hl. m. Prahu dvě kontroly, a to následnou kontrolu po finanční kontrole projektu Nové materiály a technologie pro konzervaci materiálů památkových objektů a preventivní památkovou péči“, kód DF11P010VV012 (poskytovatel MK ČR) a následnou kontrolu po kontrolní akci č. 16/19 (NKÚ) – Peněžní prostředky státu určené na účelovou podporu výzkumu a vývoje prostřednictvím rozpočtové kapitoly GA ČR.

Následující opatření byla učiněna k odstranění nedostatků v hospodaření: Byla zkvalitněna interní kontrolní činnost při schvalování a proplácení služebních cest, tak aby nedocházelo k pochybením při proplácení cestovného a stravného. Bylo realizováno školení řešitelů projektů ohledně oprávněných nákladů. Byl zaveden elektronický systém pro interní kontrolu a schvalování návrhů projektů výzkumu a vývoje.

Na základě výsledku kontroly vydal FÚ platební výměry na odvod do státního rozpočtu za porušení rozpočtové kázně ve výši 11 219,- Kč za projekt MK ČR, 42 743,- Kč, 12 651,- Kč a 8 785,- Kč za projekty GA ČR (kontrola NKÚ).

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

Finanční informace o skutečnostech, které nastaly před rozvahovým dnem, jsou uvedeny v příložené Zprávě auditora o ověření účetní závěrky za rok 2017 a její příloze. Po rozvahovém dni nenastaly skutečnosti, které by významně ovlivnily dosavadní hospodářské postavení instituce a její další vývoj. Ústav v roce 2017 hospodařil s institucionální neinvestiční dotací, která byla ve výši 85 839 tis. Kč a investiční dotací od AV ČR, která činila 37 818 tis. Kč. Vzhledem k rekonstrukci budovy „Závodní jídelny“ byla část finančních prostředků prostřednictvím rozpočtového opatření přesunuta z běžného, tj. neinvestičního hospodaření do investic a to na dokončovací práce budovy, která byla ve sledovaném roce kolaudována a zprovozněna.

Obecně lze konstatovat, že původně přidělené finance na neinvestiční výdaje ve výši 88. 409 tis. Kč byly navýšeny oproti roku 2016 cca o 10% a po rozpočtových opatřeních k 31.12. činily, jak je výše uvedeno, 83 839 tis. Kč. Investiční dotace přidělená na r. 2017 byla 4 916 tis. Kč. Její navýšení oproti roku 2016 bylo o více než 20% a po rozpočtových úpravách byla přidělena dotace na 37 818 tis. Kč.

Mezi největší investiční akce v tomto roce patří dokončení rekonstrukce budovy závodní jídelny, a pořízení přístroje (další etapa) „Zařízení pro komplexní výzkum tenkých vrstev a povrchových nanostruktur“ ve výši 12.000 tis. Kč.

V roce 2017 byl ukončen 2. rok a zahájen 3. rok fáze udržitelnosti projektu reg. č. **CZ.2.16/3.1.00/21541** s názvem Rozšíření Centra pro inovace, který byl financován z Operačního programu Praha – Konkurenceschopnost (celková výše poskytnuté dotace činila 3 806 075,27 Kč).

Prostory a přístroje Nanocentra byly v r. 2017 velkou měrou využívány k řešení dvou projektů, konkrétně:

- **15-13876S** „Zeolity se (semi)monomodální distribucí hliníku ve skeletu“ (poskytovatel GA ČR)
- **15-12113S** „Tvorba a zvládnutí struktury hierarchických zeolitů pro pokročilé hydroizomerizační katalyzátory“ (poskytovatel GA ČR)

V roce 2017 pokračoval 2. rokem projekt velké výzkumné infrastruktury **reg. č. LM2015073**, do kterého bylo Centrum pro inovace v oboru nanomateriálů a nanotechnologií začleněno (poskytovatel MŠMT). ÚFCH JH je hlavním příjemcem dotace, spolupříjemci jsou Univerzita Palackého v Olomouci, Technická univerzita v Liberci, Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem, Ústav anorganické chemie, v. v. i. a Ústav experimentální medicíny, v. v. i.

## VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště

Ústav bude v období 2018-2022 rozvíjet vědeckou a výzkumnou činnost v oblasti fyzikální chemie a relevantních dalších oborů na základě strategie schválené radou ÚFCH JH. Hlavní složkou činnosti bude formulace projektů výzkumu a vývoje a jejich realizace na základě účelového financování formou grantových projektů.

Mezi projekty zahajovanými v roce 2018 je významný zejména ERA chairs projekt **Heyrovský Chair**. Tento projekt pomáhá pozvednout vědecké instituce mezi ty nejlepší na světě. Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského je teprve druhým vědeckým centrem u nás, kterému se podařilo na toto prestižní financování dosáhnout. Celkem dostane k dispozici necelých 2,5 milionu Eur (přes 60 milionů korun), které využije mimo jiné pro získání světově uznávané vědecké osobnosti. Ta vzejde z mezinárodního výběrového řízení a měla by sestavit tým, který se bude na ÚFCH JH věnovat výzkumu chemické nanokatalýzy.

Cílem programu ERA Chairs je umožnit evropským institucím získat prvotřídní akademiky, kteří dokáží pozvednout konkrétní výzkumné oblasti na nejvyšší světovou úroveň. Dosáhnout na něj mohou vědecké instituty z těch zemí Evropské unie, které se přidaly po roce 2004. Ty navíc doplňuje Lucembursko, Portugalsko a dalších osm států mimo EU. Heyrovského ústav je teprve druhou institucí v Česku, která na toto financování dosáhla. Dalším byl brněnský CEITEC, který v roce 2014 grant využil na výzkum RNA a imunity.

Vědecká činnost bude realizována na jednotlivých odděleních ÚFCH JH v oborech biofyzikální chemie, výzkumu nízkodimenzionálních systémů, spektroskopie, struktury a dynamiky v katalýze, molekulární elektrochemie, molekulární katalýzy, elektrochemie v nanoměřítku, elektrochemických materiálů, dynamiky molekul a klastrů, teoretické chemie a chemie iontů v plynné fázi. Důraz bude kladen na mezinárodní excelenci výsledků základního výzkumu publikovaných v respektovaných mezinárodních vědeckých časopisech.

Kromě základního výzkumu budou realizovány navazující projekty aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje ve spolupráci se subjekty z oblasti průmyslu.

Součástí strategie je i rozšíření účasti ÚFCH JH v projektech EU a podpora mladých vědeckých pracovníků v rozvoji jejich vědecké kariéry.

## VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí

Ústav se podílí na výzkumných projektech, které mají vztah k ochraně životního prostředí a to jak v základním výzkumu environmentálně významné fyzikální chemie, tak i v aplikovaném výzkumu ve spolupráci s průmyslem.

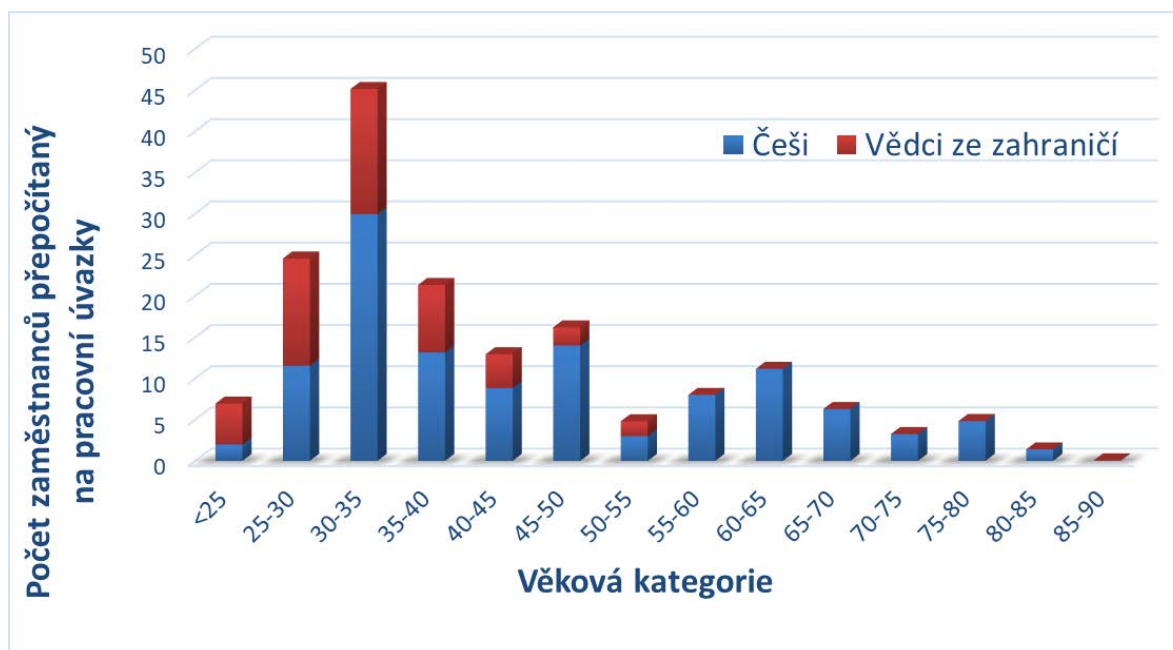
Ústav zajišťuje pravidelnou likvidaci odpadů vzniklých v souvislosti s výzkumnou činností, zejména chemikálií a odepsané kancelářské techniky s využitím služeb specializovaných firem, a to v součinnosti s úřadem městské části. Rovněž třídí vyprodukovaný odpad, konkrétně sklo, papír, plasty, baterie a akumulátory.

## IX. Aktivity v oblasti pracovně-právních vztahů

Přehled počtu zaměstnanců a rozdělení osobních nákladů jsou uvedeny v Příloze k účetní závěrce. Fyzický stav zaměstnanců k 31. 12. 2017 byl 259, průměrný přepočtený stav za rok 2017 byl 192,71. Zařazení zaměstnanců ústavu do kategorií odborných a vědeckých pracovníků na základě aktualizovaného vnitřního mzdového předpisu a karierního řádu AV ČR, je založeno na hodnocení vědecké práce vedoucími oddělení a atestační komisí na základě konkrétních kritérií. V roce 2017 se ÚFCH JH přihlásil k Evropské chartě pro výzkumné pracovníky a Kodexu chování pro přijímání výzkumných pracovníků. Zahájil tak cestu k získání certifikátu HR Excellence in Research, který vydává Evropská komise a který je zárukou profesionality v oblasti řízení lidských zdrojů, konkrétně vědeckých pracovníků.

### PŘEHLED POČTU ZAMĚSTNANCŮ K 31.12. 2017

POČET ZAMĚSTNANCŮ CELKEM	259
PRŮMĚRNÝ PŘEPOČTENÝ STAV (NA ÚVAZKY)	192,71
POČET ZAMĚSTNANCŮ (POUZE VĚDECKÉ POZICE)	217
DOKTORANDI	49
POČET ZAHRANIČNÍCH VĚDCŮ (POUZE VĚDECKÉ POZICE)	57 (24%)
POČET ŽEN (POUZE VĚDECKÉ POZICE)	85
VĚDEČTÍ PRACOVNÍCI PLACENÍ Z INSTITUCIONÁLNÍCH PROSTŘEDKŮ	61%



**Věkové rozložení vědeckých pracovníků ústavu.** Zastoupení českých a zahraničních vědců je přepočítáno na jednotlivé úvazky.

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

V roce 2017 neobdržel ÚFCH JH žádnou žádost o poskytnutí informací dle zákona č. 106/1999 Sb..

**Razítko**

**podpis ředitele instituce**

# ZPRÁVA NEZÁVISLÉHO AUDITORA

o ověření účetní závěrky za období  
od 1. ledna 2017 do 31. prosince 2017

veřejné výzkumné instituce Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR,  
v.v.i.

***Instituce:***

***Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.***

***Sídlo:***

***Dolejškova 2155/3***

***182 23 Praha 8***

***IČO:***

***613 88 955***



## **Výrok auditora**

Provedl jsem audit přiložené účetní závěrky instituce Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. (dále „Instituce“) sestavené na základě českých účetních předpisů, která se skládá z rozvahy k 31. 12. 2017, výkazu zisku a ztráty, a přílohy v účetní závěrce, která obsahuje popis použitých podstatných účetních metod a další vysvětlující informace. Údaje o Instituci jsou uvedeny v příloze této účetní závěrky.

**Podle mého názoru účetní závěrka podává věrný a poctivý obraz aktiv a pasiv instituce Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., k 31. 12. 2017 a nákladů a výnosů a výsledku jejího hospodaření za rok končící 31. 12. 2017 v souladu s českými účetními předpisy.**

## **Základ pro výrok**

Audit jsem provedl v souladu se zákonem o auditorech a standardy Komory auditorů České republiky pro audit, kterými jsou mezinárodní standardy pro audit (ISA) případně doplněné a upravené souvisejícími aplikačními doložkami. Moje odpovědnost stanovená těmito předpisy je podrobněji popsána v oddílu Odpovědnost auditora za audit účetní závěrky. V souladu se zákonem o auditorech a Etickým kodexem přijatým Komorou auditorů České republiky jsem na Společnosti nezávislý a splnil jsem i další etické povinnosti vyplývající z uvedených předpisů. Domnívám se, že důkazní informace, které jsem shromáždil, poskytují dostatečný a vhodný základ pro vyjádření mého výroku.

## **Ostatní informace uvedené ve výroční zprávě**

Ostatními informacemi jsou v souladu s § 2 písm. b) zákona o auditorech informace uvedené ve výroční zprávě mimo účetní závěrku a moji zprávu auditora. Za ostatní informace odpovídá statutární orgán.

Můj výrok k účetní závěrce se k ostatním informacím nevztahuje. Přesto je však součástí mých povinností souvisejících s auditem účetní závěrky seznámení se s ostatními informacemi a posouzení, zda ostatní informace nejsou ve významném (materiálním) nesouladu s účetní závěrkou či s mými znalostmi o účetní jednotce získanými během provádění auditu nebo zda se jinak tyto informace nejeví jako významně (materiálně) nesprávné. Také posuzuji, zda ostatní informace byly ve všech významných (materiálních) ohledech vypracovány v souladu s příslušnými právními předpisy. Tímto posouzením se rozumí, zda ostatní informace splňují požadavky právních předpisů na formální náležitosti a postup vypracování ostatních informací v kontextu významnosti (materiality), tj. zda případné nedodržení uvedených požadavků by bylo způsobilo ovlivnit úsudek činěný na základě ostatních informací.

Na základě provedených postupů, do míry, již dokáži posoudit, uvádím, že

- ostatní informace, které popisují skutečnosti, jež jsou též předmětem zobrazení v účetní závěrce, jsou ve všech významných (materiálních) ohledech v souladu s účetní závěrkou a
- ostatní informace byly vypracovány v souladu s právními předpisy.

Dále jsem povinen uvést, zda na základě poznatků a povědomí o Instituci, k nimž jsem dospěl při provádění auditu, ostatní informace neobsahují významné (materiální) věcné nesprávnosti. V rámci uvedených postupů jsem v obdržných ostatních informacích žádné významné (materiální) věcné nesprávnosti nezjistil.

### ***Odpovědnost statutárního orgánu***

Statutární orgán Instituce odpovídá za sestavení účetní závěrky podávající věrný a poctivý obraz v souladu s českými účetními předpisy a za takový vnitřní kontrolní systém, který považuje za nezbytný pro sestavení účetní závěrky tak, aby neobsahovala významné (materiální) nesprávnosti způsobené podvodem nebo chybou.

Při sestavování účetní závěrky je statutární orgán Instituce povinen posoudit, zda je Instituce schopna nepřetržitě trvat, a pokud je to relevantní, popsat v příloze účetní závěrky záležitosti týkající se jejího nepřetržitého trvání a použití předpokladu nepřetržitého trvání při sestavení účetní závěrky, s výjimkou případů, kdy zřizovatel plánuje zrušení Instituce nebo ukončení její činnosti, resp. kdy nemá jinou reálnou možnost než tak učinit.

### ***Odpovědnost auditora za audit účetní závěrky***

Mým cílem je získat přiměřenou jistotu, že účetní závěrka jako celek neobsahuje významnou (materiální) nesprávnost způsobenou podvodem nebo chybou a vydat zprávu auditora obsahující můj výrok. Přiměřená míra jistoty je velká míra jistoty, nicméně není zárukou, že audit provedený v souladu s výše uvedenými předpisy ve všech případech v účetní závěrce odhalí případnou existující významnou (materiální) nesprávnost. Nesprávnosti mohou vznikat v důsledku podvodů nebo chyb a považují se za významné (materiální), pokud lze reálně předpokládat, že by jednotlivě nebo v souhrnu mohly ovlivnit ekonomická rozhodnutí, která uživatelé účetní závěrky na jejím základě přijmou.

Při provádění auditu v souladu s výše uvedenými předpisy je mojí povinností uplatňovat během celého auditu odborný úsudek a zachovávat profesní skepticismus. Dále je mojí povinností:

- Identifikovat a vyhodnotit rizika významné (materiální) nesprávnosti účetní závěrky způsobené podvodem nebo chybou, navrhnout a provést auditorské postupy reagující na tato rizika a získat dostatečné a vhodné důkazní informace, abych jsem na jejich základě mohl vyjádřit výrok. Riziko, že neodhalím významnou (materiální) nesprávnost, k níž došlo v důsledku podvodu, je větší než riziko neodhalení významné (materiální) nesprávnosti způsobené chybou, protože součástí podvodu mohou být tajné dohody (koluze), falšování, úmyslná opomenutí, nepravdivá prohlášení nebo obcházení vnitřních kontrol.
- Seznámit se s vnitřním kontrolním systémem Instituce relevantním pro audit v takovém rozsahu, abych mohl navrhnout auditorské postupy vhodné s ohledem na dané okolnosti, nikoli abych mohl vyjádřit názor na účinnost jejího vnitřního kontrolního systému.
- Posoudit vhodnost použitých účetních pravidel, přiměřenost provedených účetních odhadů a informace, které v této souvislosti statutární orgán Instituce uvedl v příloze účetní závěrky.
- Posoudit vhodnost použití předpokladu nepřetržitého trvání při sestavení účetní závěrky statutárním orgánem a to, zda s ohledem na shromážděné důkazní informace existuje významná (materiální) nejistota vyplývající z událostí nebo podmínek, které mohou významně zpochybnit schopnost Instituce nepřetržitě trvat. Jestliže dojde k závěru, že taková významná (materiální)



nejistota existuje, je mojí povinností upozornit ve své zprávě na informace uvedené v této souvislosti v příloze účetní závěrky, a pokud tyto informace nejsou dostatečné, vyjádřit modifikovaný výrok. Moje závěry týkající se schopnosti Instituce nepřetržitě trvat vycházejí z důkazních informací, které jsem získal do data mojí zprávy. Nicméně budoucí události nebo podmínky mohou vést k tomu, že Instituce ztratí schopnost nepřetržitě trvat.

- Vyhodnotit celkovou prezentaci, členění a obsah účetní závěrky, včetně přílohy, a dále to, zda účetní závěrka zobrazuje podkladové transakce a události způsobem, který vede k věrnému zobrazení.

Mojí povinností je informovat statutární orgán Instituce mimo jiné o plánovaném rozsahu a načasování auditu a o významných zjištěních, která jsem v jeho průběhu učinil, včetně zjištěných významných nedostatků ve vnitřním kontrolním systému.

Audit provedl auditor Ing. Libor Ježek, se sídlem Vranové 1.díl 393, 468 22 Malá Skála , číslo oprávnění Komory auditorů ČR 1769.

Malá Skála dne 31. května 2018



Přílohy: Rozvaha v plném rozsahu k 31.12.2017

Výkaz zisku a ztrát v plném rozsahu za období končící k 31.12.2017

Příloha v účetní závěrce k 31.12.2017

Výčet položek  
podle vyhlášky č. 504/2002 Sb.  
ve znění vyhlášky č. 476/2003 Sb.  
a ve znění vyhlášky č. 548/2004 Sb.

# Výkaz zisku a ztráty v plném rozsahu

Název, sídlo, právní forma  
a předmět činnosti účetní jednotky

ÚFCH J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.

Praha 8

Dolejškova 2155/3

Praha 8

182 23

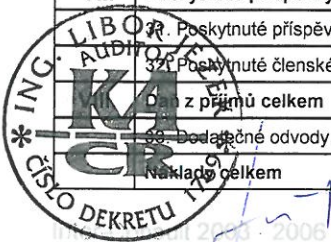
Česká republika

Věda a výzkum

ke dni 31.12.2017  
(v celých tisících Kč)

IČ
61388955

	Číslo řádku	Činnosti	
		hlavní	hospodářská
<b>A. Náklady</b>	1	256 670	
<b>I. Spotřebované nákupy celkem</b>	2	26 895	
1. Spotřeba materiálu	3	21 441	
2. Spotřeba energie	4	2 584	
3. Spotřeba ostatních neskladovatelných dodávek	5	2 870	
4. Prodané zboží	6		
<b>II. Služby celkem</b>	7	29 148	
5. Opravy a udržování	8	5 290	
6. Cestovné	9	8 216	
7. Náklady na reprezentaci	10	186	
8. Ostatní služby	11	15 456	
<b>III. Osobní náklady celkem</b>	12	138 254	
9. Mzdové náklady	13	99 864	
10. Zákonné sociální pojištění	14	32 997	
11. Ostatní sociální pojištění	15		
12. Zákonné sociální náklady	16	3 268	
13. Ostatní sociální náklady	17	2 125	
<b>IV. Daně a poplatky celkem</b>	18	331	
14. Daň silniční	19	13	
15. Daň z nemovitostí	20	2	
16. Ostatní daně a poplatky	21	316	
<b>V. Ostatní náklady celkem</b>	22	29 034	
17. Smluvní pokuty a úroky z prodlení	23		
18. Ostatní pokuty a penále	24	142	
19. Odpis nedobytné pohledávky	25		
20. Úroky	26		
21. Kursové ztráty	27	1 477	
22. Dary	28		
23. Manka a škody	29		
24. Jiné ostatní náklady	30	27 415	
<b>VI. Odpisy, prodaný majetek, tvorba rezerv a opravných položek celkem</b>	31	33 008	
25. Odpisy dlouhodobého nehmotného a hmotného majetku	32	28 508	
26. Zůstatková cena prodaného dlouhodobého nehmot. a hmot. majetku	33		
27. Prodané cenné papíry a podíly	34		
28. Prodaný materiál	35		
29. Tvorba rezerv	36	4 500	
30. Tvorba opravných položek	37		
<b>VII. Poskytnuté příspěvky celkem</b>	38		
31. Poskytnuté příspěvky zúčtované mezi organizačními složkami	39		
32. Poskytnuté členské příspěvky	40		
<b>D. z příjmů celkem</b>	41		
33. Dodatečné odvody daně z příjmů	42		
<b>Náklady celkem</b>	43	256 670	



	Číslo řádku	Činnosti	
		hlavní	hospodářská
<b>B. Výnosy</b>	44	<b>257 202</b>	
<b>I. Tržby za vlastní výkony a za zboží celkem</b>	45	<b>6 017</b>	
1. Tržby za vlastní výroby	46		
2. Tržby z prodeje služeb	47	<b>6 017</b>	
3. Tržby za prodané zboží	48		
<b>II. Změny stavu vnitroorganizačních zásob celkem</b>	49		
4. Změna stavu zásob nedokončené výroby	50		
5. Změna stavu zásob polotovarů	51		
6. Změna stavu zásob výrobků	52		
7. Změna stavu zvířat	53		
<b>III. Aktivace celkem</b>	54		
8. Aktivace materiálu a zboží	55		
9. Aktivace vnitroorganizačních služeb	56		
10. Aktivace dlouhodobého nehmotného majetku	57		
11. Aktivace dlouhodobého hmotného majetku	58		
<b>IV. Ostatní výnosy celkem</b>	59	<b>66 416</b>	
12. Smluvní pokuty a úroky z prodlení	60		
13. Ostatní pokuty a penále	61		
14. Platby za odepsané pohledávky	62		
15. Úroky	63	<b>13</b>	
16. Kursové zisky	64	<b>285</b>	
17. Zúčtování fondů	65	<b>17 125</b>	
18. Jiné ostatní výnosy	66	<b>48 993</b>	
<b>V. Tržby z prodeje majetku, zúčtování rezerv a opravných položek celkem</b>	67	<b>23</b>	
19. Tržby z prodeje dlouhodobého nehmotného a hmotného majetku	68	<b>23</b>	
20. Tržby z prodeje cenných papírů a podílů	69		
21. Tržby z prodeje materiálu	70		
22. Výnosy z krátkodobého finančního majetku	71		
23. Zúčtování rezerv	72		
24. Výnosy z dlouhodobého finančního majetku	73		
25. Zúčtování opravných položek	74		
<b>VI. Přijaté příspěvky celkem</b>	75		
26. Přijaté příspěvky zúčtované mezi organizačními složkami	76		
27. Přijaté příspěvky (dary)	77		
28. Přijaté členské příspěvky	78		
<b>VII. Provozní dotace celkem</b>	79	<b>184 746</b>	
29. Provozní dotace	80	<b>184 746</b>	
<b>Výnosy celkem</b>	81	<b>257 202</b>	
<b>C. Výsledek hospodaření před zdaněním</b>	82	<b>532</b>	
34. Daň z příjmů	83		
<b>D. Výsledek hospodaření po zdanění</b>	84	<b>532</b>	

Sestaveno dne: 31. 5. 2018

Podpisový záznam: .....

ÚSTAV FYZIKÁLNÍ CHEMIE  
 J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.  
 182 23 Praha 8, Dolejškova 3  
 IČO: 61388955, DIČ: CZ61388955





# Rozvaha (bilance) v plném rozsahu

ÚFCH J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.

Praha 8

Dolejškova 2155/3

Praha 8

182 23

Česká republika

Věda a výzkum

ke dni 31.12.2017  
(v celých tisících Kč)

IČ
<b>61388955</b>

## AKTIVA

		Číslo řádku	Stav k prvnímu dni účet. období	Stav k poslednímu dni účet. období
<b>A.</b>	<b>Dlouhodobý majetek celkem</b>	<b>Součet ř. 2+10+21+29</b>	<b>233 836</b>	<b>254 003</b>
<b>I.</b>	<b>Dlouhodobý nehmotný majetek celkem</b>	<b>Součet ř. 3 až 9</b>	<b>822</b>	<b>899</b>
	1. Nehmotné výsledky výzkumu a vývoje	3		
	2. Software	4	822	899
	3. Ocenitelná práva	5		
	4. Drobný dlouhodobý nehmotný majetek	6		
	5. Ostatní dlouhodobý nehmotný majetek	7		
	6. Pořízení dlouhodobého nehmotného majetku	8		
	7. Poskytnuté zálohy na dlouhodobý nehmotný majetek	9		
<b>II.</b>	<b>Dlouhodobý hmotný majetek celkem</b>	<b>Součet ř. 11 až 20</b>	<b>658 773</b>	<b>700 889</b>
	1. Pozemky	11	19 662	19 662
	2. Umělecká díla a předměty	12		
	3. Stavby	13	155 521	161 873
	4. Samostatné movité věci a soubory movitých věcí	14	459 794	477 318
	5. Pěstitelské celky trvalých porostů	15		
	6. Základní stádo a tažná zvířata	16		
	7. Drobný dlouhodobý hmotný majetek	17	347	347
	8. Ostatní dlouhodobý hmotný majetek	18		
	9. Pořízení dlouhodobého hmotného majetku	19	16 262	29 552
	10. Poskytnuté zálohy na dlouhodobý hmotný majetek	20	7 187	12 137
<b>III.</b>	<b>Dlouhodobý finanční majetek celkem</b>	<b>Součet ř. 22 až 28</b>		
	1. Podíly v ovládaných a řízených osobách	22		
	2. Podíly v osobách pod podstatným vlivem	23		
	3. Dluhové cenné papíry držené do splatnosti	24		
	4. Půjčky organizačním složkám	25		
	5. Ostatní dlouhodobé půjčky	26		
	6. Ostatní dlouhodobý finanční majetek	27		
	7. Pořizovaný dlouhodobý finanční majetek	28		
<b>IV.</b>	<b>Oprávky k dlouhodobému majetku celkem</b>	<b>Součet ř. 30 až 40</b>	<b>-425 759</b>	<b>-447 785</b>
	1. Oprávky k nehmotným výsledkům výzkumu a vývoje	30		
	2. Oprávky k softwaru	31	-651	-621
	3. Oprávky k ocenitelným právům	32		
	4. Oprávky k drobnému dlouhodobému nehmotnému majetku	33		
	5. Oprávky k ostatnímu dlouhodobému nehmotnému majetku	34		
	6. Oprávky ke stavbám	35	-32 864	-36 075
	7. Oprávky k samostatným movitým věcem a souborům movitých věcí	36	-391 897	-410 742
	8. Oprávky k pěstitelským celkům trvalých porostů	37		
	9. Oprávky k základnímu stádu a tažným zvířatům	38		
	10. Oprávky k drobnému dlouhodobému hmotnému majetku	39	-347	-347
	11. Oprávky k ostatnímu dlouhodobému hmotnému majetku	40		





# AKTIVA

		Číslo řádku	Stav k prvnímu dni účet. období	Stav k poslednímu dni účet. období	
<b>B.</b>	<b>Krátkodobý majetek celkem</b>	<b>Součet ř. 42+52+72+81</b>	<b>41</b>	<b>83 616</b>	<b>104 139</b>
<b>I.</b>	<b>Zásoby celkem</b>	<b>Součet ř. 43 až 51</b>	<b>42</b>	<b>1 052</b>	<b>1 037</b>
	1. Materiál na skladě		43	1 052	1 037
	2. Materiál na cestě		44		
	3. Nedokončená výroba		45		
	4. Polotovary vlastní výroby		46		
	5. Výrobky		47		
	6. Zvířata		48		
	7. Zboží na skladě		49		
	8. Zboží na cestě		50		
	9. Poskytnuté zálohy na zásoby		51		
<b>II.</b>	<b>Pohledávky celkem</b>	<b>Součet ř. 53 až 71</b>	<b>52</b>	<b>2 696</b>	<b>2 183</b>
	1. Odběratelé		53	791	958
	2. Směnky k inkasu		54		
	3. Pohledávky za eskontované cenné papíry		55		
	4. Poskytnuté provozní zálohy		56	1 209	304
	5. Ostatní pohledávky		57		
	6. Pohledávky za zaměstnanci		58	157	153
	7. Pohledávky za institucemi sociálního zabezpečení a veřejného zdravotního pojištění		59		
	8. Daň z příjmů		60	476	740
	9. Ostatní přímé daně		61		
	10. Daň z přidané hodnoty		62	11	5
	11. Ostatní daně a poplatky		63	17	19
	12. Nároky na dotace a ostatní zúčtování se státním rozpočtem		64		
	13. Nároky na dotace a ost. zúčtování s rozp. orgánů územ. samospráv. celků		65		
	14. Pohledávky za účastníky sdružení		66		
	15. Pohledávky z pevných termínových operací		67		
	16. Pohledávky z vydaných dluhopisů		68		
	17. Jiné pohledávky		69	35	4
	18. Dohadné účty aktivní		70		
	19. Opravná položka k pohledávkám		71		
<b>III.</b>	<b>Krátkodobý finanční majetek celkem</b>	<b>Součet ř. 73 až 80</b>	<b>72</b>	<b>78 653</b>	<b>99 344</b>
	1. Pokladna		73	1 009	661
	2. Ceniny		74		
	3. Bankovní účty		75	77 644	98 683
	4. Majetkové cenné papíry k obchodování		76		
	5. Dlužné cenné papíry k obchodování		77		
	6. Ostatní cenné papíry		78		
	7. Pořízení krátkodobého finančního majetku		79		
	8. Peníze na cestě		80		
<b>IV.</b>	<b>Jiná aktiva celkem</b>	<b>Součet ř. 82 až 84</b>	<b>81</b>	<b>1 215</b>	<b>1 575</b>
	1. Náklady příštích období		82	1 047	1 264
	2. Příjmy příštích období		83	168	311
	3. Kursové rozdíly aktivní		84		
	<b>AKTIVA CELKEM</b>	<b>Součet ř. 1+42</b>	<b>85</b>	<b>317 452</b>	<b>358 142</b>



# PASIVA

		Číslo řádku	Stav k prvnímu dni účet. období	Stav k poslednímu dni účet. období
<b>A.</b>	<b>Vlastní zdroje celkem</b>	<b>Součet ř. 87+91</b>	<b>275 170</b>	<b>303 668</b>
<b>I.</b>	<b>Jmění celkem</b>	<b>Součet ř. 88 až 90</b>	<b>274 625</b>	<b>303 136</b>
	1. Vlastní jmění	88	229 795	245 012
	2. Fondy	89	44 830	58 124
	3. Oceňovací rozdíly z přecenění majetku a závazků	90		
<b>II.</b>	<b>Výsledek hospodaření celkem</b>	<b>Součet ř. 92 až 94</b>	<b>545</b>	<b>532</b>
	1. Účet výsledku hospodaření	92		532
	2. Výsledek hospodaření ve schvalovacím řízení	93		
	3. Nerozdělený zisk, neuhrazená ztráta minulých let	94	545	
<b>B.</b>	<b>Cizí zdroje celkem</b>	<b>Součet ř. 95+98+106+130</b>	<b>42 282</b>	<b>54 474</b>
<b>I.</b>	<b>Rezervy celkem</b>	<b>ř. 97</b>	<b>21 600</b>	<b>26 100</b>
	1. Rezervy	97	21 600	26 100
<b>II.</b>	<b>Dlouhodobé závazky celkem</b>	<b>Součet ř. 99 až 105</b>		
	1. Dlouhodobé bankovní úvěry	99		
	2. Vydané dluhopisy	100		
	3. Závazky z pronájmu	101		
	4. Přijaté dlouhodobé zálohy	102		
	5. Dlouhodobé směnky k úhradě	103		
	6. Dohadné účty pasivní	104		
	7. Ostatní dlouhodobé závazky	105		
<b>III.</b>	<b>Krátkodobé závazky celkem</b>	<b>Součet ř. 107 až 129</b>	<b>19 562</b>	<b>27 222</b>
	1. Dodavatelé	107	1 900	8 277
	2. Směnky k úhradě	108		
	3. Přijaté zálohy	109	10	3 195
	4. Ostatní závazky	110	12	141
	5. Zaměstnanci	111	8 621	6 956
	6. Ostatní závazky vůči zaměstnancům	112	49	141
	7. Závazky k institucím sociál. zabezp. a veřejného zdravot. pojištění	113	4 916	3 952
	8. Daň z příjmů	114		
	9. Ostatní přímé daně	115	1 853	1 342
	10. Daň z přidané hodnoty	116	664	662
	11. Ostatní daně a poplatky	117		
	12. Závazky ze vztahu k státnímu rozpočtu	118	275	1 436
	13. Závazky ze vztahu k rozpočtu orgánů územních samosprávních celků	119		
	14. Závazky z upsaných nespacených cenných papírů a vkladů	120		
	15. Závazky k účastníkům sdružení	121		
	16. Závazky z pevných termínových operací	122		
	17. Jiné závazky	123	196	153
	18. Krátkodobé bankovní úvěry	124		
	19. Eskontní úvěry	125		
	20. Vydané krátkodobé dluhopisy	126		
	21. Vlastní dluhopisy	127		
	22. Dohadné účty pasivní	128	1 066	967
	23. Ostatní krátkodobé finanční výpomoci	129		
<b>IV.</b>	<b>Jiná pasiva celkem</b>	<b>Součet ř. 131 až 133</b>	<b>1 120</b>	<b>1 152</b>
	1. Výdaje příštích období	131		
	2. Výnosy příštích období	132	1 120	1 152
	3. Kursové rozdíly pasivní	133		
	<b>PASIVA CELKEM</b>	<b>Součet ř. 86+95</b>	<b>317 452</b>	<b>358 142</b>



Sestaveno dne: 31. 5. 2018

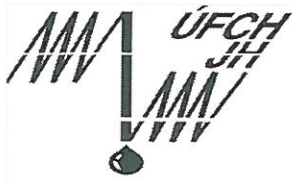
Podpisový záznam: .....

*Handwritten signature*

**ÚSTAV FYZIKÁLNÍ CHEMIE**  
J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.  
182 23 Praha 8, Dolejškova 3  
IČO: 61388955, DIČ: CZ61388955







Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.

Dolejškova 3, 182 23 Praha 8  
Telefon: 28658 3014, 26605 2011  
Fax: 28658 2307, e-mail: director@jh-inst.cas.cz  
IČO: 61388955, DIČ: 61388955

**Příloha k účetní závěrce k 31. 12. 2017**  
*za účetní období roku 2017, tj. 1.1.2017 až 31.12.2017*

Účetní jednotka: **Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.**  
Sídlo: Dolejškova 3, 182 23 Praha 8  
IČ: **61388955**  
Právní forma: Veřejná výzkumná instituce (v.v.i.)  
Zápis: V rejstříku veřejných výzkumných institucí vedených MŠMT ČR ze dne 3. 7. 2006 pod spis. zn. 17 113/2006-34/ÚFCH JH  
Zřizovatel: Akademie věd České republiky – organizační složka státu, Národní 1009/3, 11720 Praha 1, IČ: 60165171  
Statutární orgán: **Prof. Dr. Martin Hof, Dr. Rer. nat. DSc.**, ředitel  
Prof. RNDr. Patrik Španěl Dr. rer. nat., *zást. řed. pro vědu*  
Doc. Mgr. Michal Fárník Ph. D. DSc. *zást. řed. pro vzdělávání*  
RNDr. Ing. Martin Kalbáč Ph.D. *zást. řed. pro ekonomiku a správu*  
  
Další orgány: Dozorčí rada ve složení  
Ing. Petr Bobák, CSc. – předseda (AV ČR)  
RNDr. Jan Hrušák, CSc. – místopředseda (ÚFCH JH)  
Ing. Zbyněk Černý, CSc. – člen (ÚACH)  
Doc. Mgr. Iva Matolínová, DSc. – člen (MFF UK)  
doc. Ing. Jiří Homola, DSc. – člen (ÚFE)  
  
Rada instituce (interní členové)  
Prof. RNDr. Patrik Španěl Dr. rer. nat. – předseda  
Prof. RNDr. Kavan Ladislav, CSc., DSc. – místopředseda  
Mgr. Jiří Dědeček, CSc., DSc. – člen  
Prof. Dr. Martin Hof, Dr. rer. nat. DSc. – člen  
Mgr. Michal Horáček, Ph. D. – člen  
Mgr. Magdaléna Hromadová, Ph. D. – člen  
RNDr. Ing. Martin Kalbáč Ph.D. – člen  
Doc. Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat. DSc. – člen  
Prof. RNDr. Zdeněk Samec, DrSc. – člen  
  
**Rozvahový den: 31. 12. 2017**  
Okamžik sestavení účetní závěrky: 31. 05. 2018

V roce 2017 skončilo ze zákona (č. 341/2005 Sb. o v.v.i.) funkční období všem orgánům ÚFCH JH včetně statutárního. V souladu s výše citovaným zákonem byly ustanoveny nové orgány a to s platností od 1. 5. 2017. Nejvyšším orgánem ze zákona je „**Dozorčí rada**“, jediným **statutárním zástupce je ředitel**, práva a odpovědnost „**Rady instituce**“ jsou dány zákonem č. 341/2005 Sb.

Předmětem hlavní činnosti **Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. (ÚFCH JH)** je vědecký výzkum ve fyzikální chemii, elektrochemii, analytické chemii a chemické fyzice.

Svou hlavní činností ústav přispívá ke zvyšování úrovně poznání a vzdělanosti a k využití výsledků vědeckého výzkumu v praxi, například poskytuje vědecké posudky, provádí konzultační a poradenskou činnost, ve spolupráci s vysokými školami uskutečňuje doktorské studijní programy a vychovává vědecké pracovníky, rozvíjí mezinárodní spolupráci, organizuje konference, semináře a přednášky.

V rámci hlavní činnosti ústav zajišťuje infrastrukturu výzkumu, včetně poskytování ubytování svým zaměstnancům a hostům. Dále zajišťuje i komerční činnost ve vědě a výzkumu, kde provádí takové



činnosti, které nelze běžně provádět, či zajišťovat prostřednictvím komerčních firem, jako jsou např. různá měření a testy. Též zajišťuje pořádání vědeckých seminářů a konferencí. Z komerčních „nevědeckých“ činností pronajímá volné prostory v nemovitostech hlavně jako ubytovací kapacitu pro vědce a minimální část k běžným komerčním účelům. V tomto účetním období ÚFCH JH nezajišťoval stravování pracovníků areálu z důvodu kompletní rekonstrukce budovy. Část příjmů je zajištěna i výnosem z úroků na běžném účtu. Tyto úroky se staly však v letošním roce bezvýznamné.

Podle výše uvedeného, účetní jednotka vykonává činnosti, které jsou plně v souladu s § 21 zákona č.341/2005 Sb. v platném znění. Jiné nevědecké činnosti, které jsou ryze komerčního charakteru, jsou vykonávány v omezené míře a zisk z těchto činností slouží jako příspěvek na hlavní činnost nebo jsou z něj financovány ty vědecké činnosti nebo podpory vědy a výzkumu, které s ohledem na zákon č. 130/2002 Sb. nemohou být financovány z institucionálních prostředků nebo grantů.

ÚFCH JH nemá podíly v žádných obchodních společnostech a nemá žádné jiné vklady v jiných organizacích nepodnikatelského typu. Rovněž tak není ovládajícím subjektem v jiných organizacích a není ovládána jinou osobou s výjimkou svého zřizovatele, jehož práva a povinnosti jsou jednoznačně stanoveny v příslušných ustanovení v zákona č. 341/2005 Sb. (viz. např. §15).

### **Právní úprava a informační systém**

ÚFCH JH AV ČR, v.v.i. podle § 29 Zákona č. 341/2005 Sb. o veřejných výzkumných institucích v platném znění vede účetnictví podle Zákona č. 563/1991 Sb. o účetnictví v platném znění a vyhlášky Ministerstva financí č. 504/2002 Sb. ze dne 6. listopadu 2002, kterou se provádějí některá ustanovení Zákona č. 563/1991 Sb., o účetnictví, ve znění pozdějších předpisů, pro účetní jednotky, u kterých hlavním předmětem činnosti není podnikání, pokud účtují v soustavě podvojného účetnictví.

Zpracování účetnictví je zajištěno účetním systémem HELIOS ORANGE firmy ASSECO SOLUTIONS. Systém HELIOS ORANGE je modulární systém ekonomických agend, určený pro všechny typy organizací, tedy i pro nevýdělečné. Na tento systém přešla organizace od 1. 1. 2009 a v novém systému je zpracovávána kompletní ekonomická administrativa instituce.

Účtový rozvrh roku 2017 navazuje na účetní rozvrh roku 2016 a je zpracován v souladu se závazným členěním účtové osnovy, vyplývající z obecně platných předpisů (viz. vyhl. č. 504/2002 Sb. v platném znění) a potřeb zřizovatele až na úroveň syntetických a analytických účtů.

Účtování (tzv. vnitropodnikové) v účetní jednotce je, stejně jako v předchozích účetních obdobích, jak zakázkové (granty, úkoly), tak střediskové, ale hlavně dle typu financování, „institucionální“ (int. ozn. TA100), „grantové“ (int. ozn. TA120), „vlastní“ (int. ozn. TA220). Na institucionálním okruhu jsou zachyceny příjmy pouze dotace od AV ČR (provozní) a všechny provozní výdaje, které jsou spjaty s chodem ÚFCH JH. Na „vlastním okruhu“ financování jsou zachyceny veškeré příjmy, s výjimkou institucionální dotace a grantových dotací. Na tomto okruhu jsou zachycovány náklady, které se přímo vážou, resp. lze přímo přiřadit na tržby s nimi souvisejícími.

Vzhledem k tomu, že i v tomto účtovém období výdaje v institucionálním okruhu byly vyšší než dotace od AV ČR, skončilo hospodaření ztrátou. Naopak hospodaření na okruhu TA 220 je přebytkové a to z toho důvodu, že na tomto okruhu do výnosů jsou účtovány, podle předem stanovených podmínek grantovou agenturou, tzv. „overheady“, což je příspěvek z grantových projektů na režii. Z tohoto přebytku, který je k tomuto účelu určen, se pak pokrývá ztrátové hospodaření na TA 100. Tato kompenzace je v souladu s předpisy, protože ÚFCH JH, je v.v.i., nikoliv rozpočtovou organizací, kde je takováto kompenzace zakázána.

Protože v r. 2017 byly upraveny v některých případech podmínky financování grantů ve mzdové oblasti s tím, že zde se částečně podílí i institucionální dotace (TA 100) došlo k jednorázovému nárůstu nákladů mezi TA 100 a TA 220 až na konci účetního období. To vyrovnání, přesun nákladů mezi TA 100 a TA 220, nemá žádný vliv na hospodářský výsledek ÚFCH JH jako celku.





ÚFCH JH účtuje o zásobách materiálu způsobem „A“, výdej zásob ze skladu je účtován cenami zjištěnými aritmetickým průměrem. O zásobách pohonných hmot, které jsou z hlediska organizace bezvýznamné, se účtuje způsobem „B“. Celkové zásoby tvoří z hlediska účetní jednotky jako celku nevýznamnou položku.

### Způsoby oceňování:

Účetní jednotka oceňuje majetek, pohledávky a závazky standardním způsobem a to v souladu se zákonem č. 563/1991 Sb. o účetnictví a na tento zákon navazující vyhláškou č. 504/2002 Sb.

- hmotný a nehmotný dlouhodobý majetek je oceněn pořizovací cenou
- zásoby materiálu jsou účtovány způsobem „A“ a v inventuře byly oceněny pořizovacími cenami
- zásoby vlastní výroby v r. 2017 nebyly
- peníze jsou oceněny jmenovitými hodnotami
- pohledávky a závazky jsou oceněny jmenovitými hodnotami

### Majetek

Metodika účtování majetku zůstává stejná jako v minulých účetních obdobích. Sledování majetku s vyšší cenou než 5 tis. Kč a delší životností než 1 rok, je v modulu „Majetek“ na jednotlivých inventárních kartách.

Drobný majetek je účtován přímo do nákladů a je evidován v majetkové evidenci podle osob a útvarů. Pokud to vyžaduje jiný smluvní dokument, např. grantová smlouva, dotace apod., je evidován i na příslušný grant, resp. dotaci.

Dlouhodobý majetek je evidován v souladu s vyhláškou č. 504/2002 Sb. na majetkových účtech a odepisuje se prostřednictvím účetních odpisů rovnoměrně do výše ceny, ve které je majetek oceněn v účetnictví, podle odpisového plánu. Daňově majetek není odepisován.

Odpisové sazby, použité v účetnictví, se oproti roku 2016 nezměnily. (pozn. účetní odpisy nejsou daňově účinné):

Název a interní označení (dle číselníku majetku)	Odpisová sazba % r. 2017	Odpisová sazba % r. 2016
Budovy - stavby, sk. H1, H2	2,00	2,00
Energ. stroje, sk. H3	10,00	10,00
Pracovní stroje, sk. H4	20,00	20,00
Přístroje, sk. H5 bez rychleji odepisovaných	20,00	20,00
Přístroje z grantů, sk. H5 - odepisované 4 roky	25,00	25,00
Přístroje z grantů, sk. H5 - odepisované 6 let	16,67	16,67
Výpočetní technika, sk. PC	33,30	33,30
Dopravní prostředky, sk. H6	20,00	20,00
Inventář, sk. H7 -	10,00	10,00
Nehmotný investiční majetek, sk. PG	20,00	20,00

Účetní odpisy ve výši 28 508 048,17 Kč jsou nákladovou položkou, avšak daňově neúčinnou. Na druhé straně k těmto odpisům je zúčtováno finanční krytí, které je také daňově neúčinným výnosem (viz § 18a zákona č. 586/1992 Sb.).

ÚFCH JH v r. 2017 vyřadila bezplatně zapůjčenu aparaturu od ústavu Maxe Plancka v Gottingenu v hodnotě 15.000 tis. Kč (IČ. zapůjčitele SFB 357 14/93 a SFB 357 175/96). Toto zařízení bylo evidováno v podrozvahové evidenci jako zápůjčka. Zápůjčka měla končit původně končit v r. 2014, ale po dohodě s ústavem Maxe Plancka byla prodloužena a v roce 2017 došlo k ukončení v r. 2017 a přestože pro morální zastaralost, fyzické opotřebení i nereálnost původní ceny. Po dohodě obou stran, kdy zapůjčitel nepožadoval vrácení, došlo k jejímu vyřazení.





## Další informace

### Kurzy

Aktiva a závazky v cizí měně na účtech účtových skupin 21-Peníze, 22-Účty v bankách a na účtech pohledávek a závazků byla k rozvahovému dni přepočtena aktuálními směnnými kurzy vyhlášenými ČNB k 31. 12. 2017:

1 EUR	25.540 CZK
1 USD	21,291 CZK

V průběhu roku ÚFCH JH, jako účetní jednotka, používala k oceňování účetních operací v cizí měně v souladu s § 24 Zákona o účetnictví pevný kurz, který činil:

1 EUR	27.020 CZK
1 USD	25,639 CZK

### Pohledávky

Pohledávky účetní jednotky jsou průběžně hrazeny. K pohledávkám nejsou tvořeny opravné položky a v aktuálním roce nebyla odepsána žádná pohledávka. Problematická pohledávka je za společností „40-30 Seyssinet“ se sídlem ve Francii, která se dostala do finančních problémů. Pohledávka činí 1.750,- Euro (47.993,75 Kč). Společnost z této pohledávky splatila 52,50 Euro (1.418,81 Kč) šekem v r 2016, v aktuální roce to bylo 70,- Euro. Vzhledem k tomu, že pohledávka není nedobytná a probíhají splátky, tak k této pohledávce nejsou zúčtovány žádné opravné položky, zůstává v původní, která je snižována o postupně o obdržené splátky. Vzhledem k celkovému obratu není tato pohledávka významná.

### Závazky

Závazky jsou průběžně hrazeny a účetní jednotka nemá žádné neuhrazené závazky po lhůtě splatnosti.

### Jiné

ÚFCH JH, jako nezisková organizace, je příjemce dotací jak ze státního rozpočtu (od AV ČR, MŠMT, MPO apod.), tak i od jiných subjektů (např. od EU). Protože s těmito prostředky musí hospodařit tak, jak jí ukládá smlouva nebo jiný závazný dokument o hospodaření s těmito prostředky, upřednostňuje zaúčtování výdajů dle těchto dokumentů a to s přihlédnutím k ustanovení § 8 odst. 3 Zákona č. 280/209 Sb. (Daňový řád) a § 24 odst. 2 písm. zc Zákona č. 586/1992 Sb. o daních z příjmů. Kontrolu vyúčtování těchto prostředků provádí poskytovatel a to buď přímo, nebo prostřednictvím pověřené osoby, obvykle auditorem. Rovněž tak při účtování jednotlivých položek do výdajů (účetních nákladových skupin) jsou upřednostňovány požadavky poskytovatele před obecnými předpisy (např. vyhl. č. 504/2002 Sb.). V případě nedodržení pokynů poskytovatele je nebezpečí, že by (i z formálních důvodů) výdaj neuznal a ÚFCH JH by musel dotaci vrátet v plné výši.

**Závazky**, které jsou interně nazývány státními platbami, tj. zejména platby za zdravotní a sociální pojištění a platby z titulu daní (mezd i silniční), byly uhrazeny v řádném lednovém termínu.

### Zaměstnanci

**Přehled počtu zaměstnanců ÚFCH JH k 31. 12. 2017:**

1. ve fyz. osobách	259
2. přepočtený stav	192,71

**Počet a postavení zaměstnanců, kteří jsou zároveň členy statutárních, kontrolních nebo jiných orgánů ústavu:**

Tato informace je v plném rozsahu uvedena v záhlaví této přílohy.



Členům „Dozorčí rady“ ústavu byla v roce 2017, stejně jako v letech minulých, vyplacena odměna v celkové výši 178 tis. Kč. Žádné jiné funkční požitky z titulu jejich funkce vyplaceny nebyly.

Příděl do sociálního fondu z mezd, který je pro v.v.i. **povinný ze zákona č. 341/2005 Sb. (§ 27 odst.1) ve výši 2%** činil 1.930 tis. Kč, což je oproti r. 2016 mírný nárůst. Tento příděl je povinný podle § 27 odst. 1 zák. č.341/2005 Sb. o v.v.i.,

V roce 2017 účetní jednotka tvořila FÚUP z institucionálních prostředků ve výši 2.500 tis. Kč. Čerpání z tohoto fondu v r. 2017 bylo ve výši 3 186 tis. Kč a to na základě toho, že čerpání již bylo povinné. Účetní jednotka požádala zřizovatele, aby část provozních prostředků, ze kterých byl FÚUP tvořen, byly rozpočtovým opatřením převedeny do investičního financování (investičního rozpočtu). Tyto investiční výdaje souvisely s dokončením rekonstrukce budovy ZJ


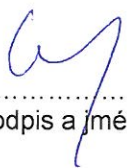
V roce 2017 mezi rozvahovým dnem a okamžikem sestavení účetní závěrky nenastaly žádné významné události, které by měly vliv na účetní závěrku r. 2017 nebo zásadním způsobem ovlivnily ekonomické ukazatele účetní jednotky.

### Rezervy

Na r. 2019 je plánována generální oprava další nemovitosti (ubytovny) v Michli s předpokládaným rozpočtem cca 50 mil. Kč. Z tohoto důvodu v r. 2017 pokračuje tvorba rezervy a to ve výši 4.500 tis. Kč.

### Ostatní

Účetní jednotka využívá ustanovení § 20 odst. 7 zákona č. 586/1992 Sb. o DZP. Toto daňové zvýhodnění užívá pouze pro svoji hlavní činnost a mj. i za tímto účelem vede střediskové účtování podle typu financování (viz úvod). Toto financování, úsporou za daňové povinnosti, je přednostně využíváno v následujícím roce na hrazení běžných výdajů ÚFCH JH. Vzhledem k akruálnímu principu účetnictví, kdy jsou odděleny předpisy plateb od vlastního financování, nelze toto financování z účetnictví prokázat. Použití daňového zvýhodnění je patrné z toho, že instituce používá veškeré finanční prostředky pouze na vědu a výzkum a režii s touto činností přímo spjatou.

Datum sestavení: 31.5. 2018	Sestavil: Ing. Ivo Friedjung  ..... Podpis a jméno	Statutární zástupce: prof. Prof. Dr. Martin Hof, Dr. Rer. nat. DSc.  ..... Podpis a jméno
-----------------------------	---	---

