

VÝROČNÍ ZPRÁVA

O ČINNOSTI A HOSPODAŘENÍ ZA ROK 2019

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

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: 9. června 2020

Radou instituce schválena dne 24. června 2020

V Praze dne 26. června 2020

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
C) Informace o činnosti orgánů:	5
Ředitel instituce.....	5
Rada instituce.....	6
Dozorčí rada.....	7
II. Informace o změnách zřizovací listiny.....	8
III. Hodnocení hlavní činnosti.....	9
III. 1. Nejvýznamnější výsledky.....	10
Oddělení teoretické chemie (1).....	10
Oddělení spektroskopie (2)	12
Oddělení biofyzikální chemie (3)	13
Oddělení struktury a dynamiky v katalýze (4).....	14
Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy (5).....	15
Oddělení výpočetní chemie (6)	16
Oddělení elektrochemických materiálů (7).....	17
Oddělení elektrochemie v nanoměřítku (8).....	19
Oddělení chemie iontů v plynné fázi (9).....	20
Oddělení nízkodimenzionálních systémů (10)	21
Oddělení dynamiky molekul a klastrů (11).....	23
Oddělení nanokatalýzy (12)	24
Nejvýznamnější publikace:	25
III. 2 Významné projekty.....	28
Vybrané výzkumné projekty	28
Vybrané strategické projekty	29
III. 3. Významná ocenění.....	31
III. 4. Propagace a popularizace	32
III. 5. Vědecká a pedagogická spolupráce pracoviště s vysokými školami.....	34
III. 6. Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou.....	36
Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané řešením projektů	36

Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané na základě smluv.....	37
Společné projekty výzkumu a vývoje podpořené z veřejných prostředků	38
Informace o zaměstnancích pracoviště, kteří zastávali funkce v řídicích orgánech významných mezinárodních vědeckých organizací.....	39
III. 7. Mezinárodní vědecká spolupráce	40
Projekty financované Evropskou komisí v programu HORIZONT 2020.....	40
Mezinárodní projekty, které byly řešené v rámci mezinárodní vědecké spolupráce mimo rámcových programů EU.....	41
III. 8. Konference a zahraniční hosté.....	41
Konference s mezinárodní účastí	41
Významné vědecké akce na národní úrovni, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spoluorganizátor	42
Zahraněční hosté ústavu	42
IV. Hodnocení další a jiné činnosti: Ekonomické oddělení.....	44
V. Informace o opatřeních k odstranění nedostatků v hospodaření a zpráva, jak byla splněna opatření k odstranění nedostatků uložená v předchozím roce .	44
VI. Finanční informace o skutečnostech, které jsou významné z hlediska posouzení hospodářského postavení instituce a mohou mít vliv na její vývoj.....	45
VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště.....	45
VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí.....	46
IX. Aktivity v oblasti pracovně-právních vztahů-oddělení ekonomické dodat	46
X. Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb., o svobodném přístupu k informacím.....	47

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

A) Výchozí složení orgánů pracoviště

Ředitel instituce

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

Jmenován s účinností od: 1. 5. 2017

Rada instituce

zvolena dne:

23. 1. 2017 ve složení:

Předseda:

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

Místopředseda:

prof. RNDr. Ladislav Kavan, CSc., DSc.

Interní členové (ÚFCH JH)

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

Mgr. Michal Horáček, Ph. D.

doc. Mgr. 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.

doc. RNDr. Ing. Martin Kalbáč, Ph. D.

Externí členové:

prof. RNDr. Jiří Barek, CSc.

Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze

prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Fakulta chemické technologie Vysoké školy

chemicko-technologické v Praze

prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.

Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR

prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Fakulta chemického-inženýrství Vysoké školy

chemicko-technologické v Praze

prof. RNDr. Eva Tesařová, CSc.

Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze

Dozorčí rada

- Předseda:** Ing. Petr Bobák, CSc.,
Ústav živočišné fyziologie a genetiky, AV ČR, v. v. i.
- Místopředseda:** RNDr. Jan Hrušák, CSc.,
Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, AV ČR, v. v. i.
- Členové:** Ing. Zbyněk Černý, CSc.
Ústav anorganické chemie, AV ČR, v. v. i.
- prof. Ing. Jiří Homola, CSc., DSc.
Ústav fotoniky a elektroniky, AV ČR, v. v. i.
- doc. Mgr. Iva Matolínová, Dr.
Matematicko-fyzikální fakulta UK

B) Změny ve složení orgánů

V roce 2019 neproběhly žádné změny ve složení orgánů.

C) Informace o činnosti orgánů:

Ředitel instituce

Hlavní aktivity ředitele v řízení instituce:

- a) organizace jednání kolegia ředitele, které se v roce 2019 konalo celkem 14krát; závěry z jednání jsou zveřejněny na interních webovských stránkách ústavu,
- b) předložení návrhu rozpočtu na rok 2019 Dozorčí radě k vyjádření a Radě instituce ke schválení,
- c) předložení Výroční zprávy o činnosti a hospodaření za rok 2018 po ověření účetní uzávěrky auditorem Dozorčí radě k vyjádření a Radě instituce ke schválení,
- d) podání návrhů na Prémii Otto Wichterleho, Hlávkovu cenu a Praemium 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 2019,
- g) přijetí nových pracovníků na základě konkurzního řízení a rozhodnutí o prodloužení nebo novém zařazení pracovníků ústavu na základě jejich atestace,
- h) organizace 29. Brdičkovy přednášky,

ch) jmenování Monitorovací skupiny pro proces implementace Human Resources Strategy for Researchers (HRS4R) v souvislosti s oceněním „HR Excellence in Research Award“,

i) jmenování komisí včetně Atestační komise, Komise pro etiku vědecké práce. Dále jmenování vědeckého ombudsmana, jmenování projektové skupiny a stanovení Kritérií hodnocení vědecké práce.

Rada instituce

V roce 2019 se jednání Rady instituce uskutečnilo celkem 22krát, z toho 19 jednání proběhlo formou hlasování per rollam.

8. Zasedání RI (2. 5. 2019)

- Rada schválila rozpočet ÚFCHJH na rok 2019.
- Rada schválila zápis a usnesení ze 7. zasedání RI (z 6. 12. 2018).
- Rada schválila zápisy a usnesení z hlasování per rollam ze dnů 17. 12. 2018, 31. 1. 2019, 7. 3. 2019, 25. 3. 2019, 28. 3. 2019, 18. 4. 2019.

9. Zasedání RI (20. 6. 2019)

- Rada schválila zápis a usnesení z 8. zasedání RI (z 2. 5. 2019).
- Rada schválila zápisy a usnesení z hlasování per rollam ze dnů 27. 5. 2019, 5. 6. 2019 a 13. 6. 2019.
- Rada bere předloženou Výroční zprávu o činnosti a hospodaření za rok 2018 včetně příložené zprávy nezávislého auditora na vědomí a souhlasí s jejím zněním.
- Rada instituce se ztotožňuje s obsahem dopisu ředitele ÚFCH JH rektorovi Univerzity Palackého v Olomouci vyjadřujícím podporu úsilí o udržení vysokého standartu etiky vědecké práce.

10. Zasedání RI (25. 11. 2019)

- Rada schválila zápis a usnesení z 9. zasedání RI z 20. 6. 2019.
- Rada schválila zápisy a usnesení z hlasování per rollam ze dnů 4. 7. 2019, 11. 7. 2019, 22. 8. 2019, 30. 8. 2019, 11. 9. 2019, 18. 9. 2019, 20. 9. 2019, 26. 9. 2019, 14. 10. 2019, 4. 11. 2019, 11. 11. 2019, 15. 11. 2019 a 17. 11. 2019.
- RI na základě konzultace s IAB navrhuje uskutečnit volbu ombudsmanů na shromáždění všech VŠ vzdělaných pracovníků vědeckých oddělení ústavu svolaného e-mailem. RI dále navrhuje funkční období pro ombudsmana 3 roky s možností jednoho opakování.
- RI navrhuje rozšířit kritéria hodnocení vědecké práce o příspěvek k vytváření duševního vlastnictví a o prokázání samostatné vize vědecké práce a ukládá P. Španělovi, aby do vyhlášení příštích atestací navrhl upravené znění kritérií.

Rada instituce schválila per rollam následující usnesení:

- Rada instituce podpořila podání celkem 79 návrhů grantových projektů, z toho 40 projektů GAČR a 3 projekt MŠMT.

- Rada instituce souhlasí s nominací RNDr. Viliama Kolivošky, Ph.D, MBA, Ing. Petra Kovaříčka, Ph.D. a Mgr. Ing. Evy Krupičkové Pluhařové, Ph.D. na „Prémii Otto Wichterleho“.

- Rada instituce schvaluje dokumenty „PRAVIDLA PRO ČERPÁNÍ SOCIÁLNÍHO FONDU Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR, v. v. i pro rok 2019“ a „Rozpočet čerpání sociálního fondu na rok 2019“ v předloženém znění.

- Rada instituce doporučuje podání žádosti o podporu z Programu podpory perspektivních lidských zdrojů - Mzdová podpora postdoktorandů na pracovištích AV ČR pro následující kandidáty v tomto pořadí:

1.) Mgr. Monika Klusáčková, Ph.D.

2.) Mgr. Štěpánka Nováková Lachmanová, Ph.D.

3.) Ashok Chilukoti, Ph.D.

1.) Mgr. Zuzana Melníková, Ph.D.

2.) RNDr. František Vavrek, Ph.D.

- Rada instituce doporučuje jmenování "Komise pro etiku vědecké práce" v následujícím složení:

předseda: FRANK Otakar

místopředsedkyně: DRYAHINA Kseniya

členové: ČURÍK Roman, SÝKORA Jan, TABOR Edyta, HORÁČEK Michal, MINHOVÁ MACOUNOVÁ Kateřina, FEDOR Juraj a KRUPIČKOVÁ PLUHAŘOVÁ Eva.

- Rada instituce schvaluje udělení pozice "významného vědeckého pracovníka" Dr. Karlu Machovi v rozsahu úvazku 0,5 na dobu dvou let.

- Rada instituce schvaluje „Přílohu č. 1 -Tarifní rozpětí a příplatky za vedení“ Vnitřního mzdového předpisu ÚFCH JH v předloženém znění.

- Rada instituce schválila znění dokumentu Guidance on Authorship in Scientific Publications

- Rada instituce souhlasí s uzavřením předloženého Memoranda o spolupráci mezi ÚFCH JH a Policií České republiky.

Veškerá per-rollam usnesení byla beze změn schválena na nejbližším možném zasedání rady.

Dozorčí rada

V roce 2019 proběhlo zasedání Dozorčí rady Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., dne 31. 5. 2019 a šest jednání per rollam k datům 24. 1. 2019, 28. 3. 2019 (dvě jednání), 28. 6. 2019, 23. 9. 2019, 26. 11. 2019.

Zasedání DR dne 31. 5. 2019

- DR projednala Návrh rozpočtu ÚFCH JH na rok 2019. Dále navrhuje, aby zařazení zisku do rezervního fondu bylo projednáno per rollam a doporučuje vypracovat podrobnější informace o výkazu hospodářských smluv.
- DR projednala a bere na vědomí Výroční zprávou o činnosti a hospodaření za rok 2018.
- DR schvaluje Zprávu o činnosti DR za rok 2018.
- DR projednala a bere na vědomí text zprávy Auditora o ověření účetní uzávěrky za rok 2018. Auditorem pro ověření účetní uzávěrky pro rok 2019 dle Smlouvy o provedení auditu byl určen Ing. L. Ježek.
- DR schvaluje Hodnocení manažerských schopností ředitele ÚFCHJH dle předloženého návrhu.

Dozorčí rada schválila per rollam následující usnesení:

1) DR souhlasí se Smlouvou o nájmu sloužícího podnikání s firmou Three Bond Czech s. r. o., se sídlem U Slovanky 1388/5, 182 00, Praha 8 - Libeň.

Schválení proběhlo formou per rollam č. 45 k datu 24. 1. 2019.

2) DR souhlasí se Smlouvou o nájmu prostoru sloužícího podnikání s panem Ivanem Černým, Diviznová 1087, 250 82, Květnice.

Schválení proběhlo formou per rollam č. 46 k datu 28. 3. 2019.

3) DR souhlasí se Smlouvou o nájmu prostoru sloužícího podnikání s paní Danou Kapkovou, Famfulíkova 1133/14, 182 00, Praha 8- Kobylice.

Schválení proběhlo formou per rollam č. 47 k datu 28. 3. 2019.

4) DR projednala Smlouvu o nájmu prostoru sloužícího podnikání s firmou Advanced Materials – JTJ s. r. o., Kamenné Žehrovice čp. 23, 273 01, Kladno a uděluje předchozí písemný souhlas k uzavření této smlouvy.

Schválení proběhlo formou per rollam č. 48 k datu 28. 6. 2019.

5) DR souhlasí se Smlouvou o nájmu nebytových prostor s Fyzikálním ústavem AV ČR, v. v. i., Na Slovance 1999/2; 182 21 Praha 8 - Ládví.

Schválení proběhlo formou per rollam č. 49 k datu 23. 9. 2019.

6) DR souhlasí se Smlouvou o ubytování v ubytovně s Ústavem fyziky plazmatu AV ČR, v. v. i., Za Slovankou 1782/3, 182 00 Praha 8 - Libeň

Schválení proběhlo formou per rollam č. 50 k datu 26. 11. 2019.

Všichni členové Dozorčí rady i Rady instituce podepsali čestné prohlášení o tom, že si nejsou vědomi toho, že by oni či jejich rodinní příslušníci byli účastní v osobách, s nimiž účetní jednotka, Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., uzavřel za účetní období 1. 1. 2019 - 31. 12. 2019 obchodní smlouvy nebo jiné smluvní vztahy.

II. Informace o změnách zřizovací listiny

Ve Zřizovací listině nebyly v roce 2019 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 2020 pokračoval v teoretickém i experimentálním výzkumu ve vybraných oblastech chemické fyziky, elektrochemie, katalýzy a příslušných oborů. Výzkumná činnost probíhá ve 12 odděleních a jednom vědecko-výzkumném centru.

Ústav aktivně podporuje internacionalitu, v současnosti je mezi 234mi vědci 88 zahraničních pracovníků.

Jako poradní orgán ředitele byl ustanoven Mezinárodní poradní sbor ve složení:

prof. Timo Jacob, Ulm University, Germany

prof. Philipp Kukura, University of Oxford, United Kingdom

prof. Peter Rapta, Slovak University of Technology in Bratislava, Slovakia

prof. Dr. Jeroen Anton van Bokhoven, ETH Zürich, Switzerland

prof. Dr. Leticia Gonzales, Universitat Wien, Austria

III. 1. Nejvýznamnější výsledky

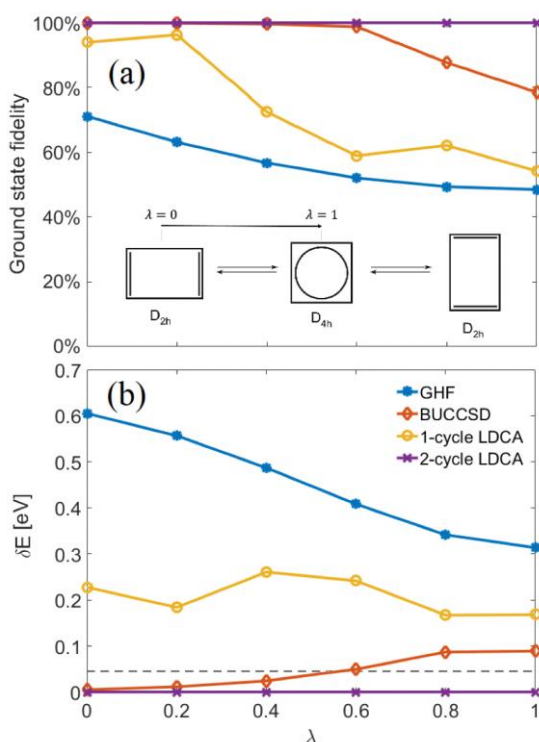
V rámci řešení výzkumného záměru a grantových projektů byly dosaženy v jednotlivých odděleních významné výsledky uvedené v této sekci.

Oddělení teoretické chemie (1)

Skoro-lineární kvantové obvody pro přípravu korelovaných fermionických stavů

Představili jsme nový způsob přípravy fermionických korelovaných stavů na kvantovém počítači, který na rozdíl od jiných přístupů využívá referenční stav ve tvaru zobecněného Hartreeho-Fockova řešení, a je tak schopný správně popsat silně korelované systémy (ve fyzice i chemii). Navíc rozšířením sady použitých kvantových hradel o fázový coupling nejbližších qubitů jsme získali kvantové obvody s mimořádnou přesností.

Spolupracující subjekt: Department of Chemistry and Chemical Biology, Harvard University, Cambridge MA, 02138



Automerizace cyklobutadienu. Testy přesnosti skoro-lineárních kvantových obvodů (LDCA1, LDCA2) pro přípravu fermionických stavů na příkladu automerizace cyklobutadienu.

P. L. Dallaire-Demers, J. Romero, L. Veis, S. Sim, A. Aspuru-Guzik, Low-depth circuit ansatz for preparing correlated fermionic states on a quantum computer, *Quantum Science and Technology*, 2019, 4, 4, 045005

R-maticové výpočty srážek elektronu s atomem lítia při nízkých energiích

Práce se zabývá výpočty srážek elektronu s atomem lítia na energiích pod excitačním prahem 3s. Fázové posuny $^1S^e$, $^3S^e$ a $^1P^o$ vypočtené pro nízké energie blízko prahu jsou ve

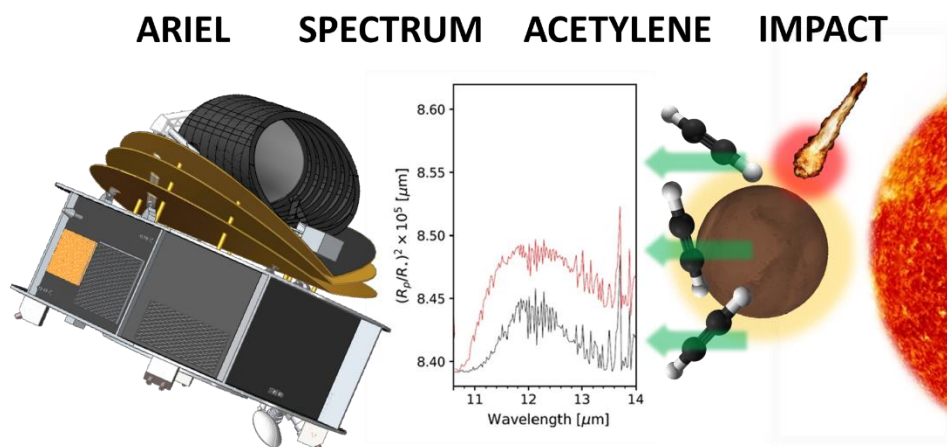
vynikající shodě s předchozími teoretickými pracemi. Práce důkladně analyzuje prahové chování fázového posunutí $^3P^o$ a rezonance, která se nachází na rozptylové energii ~ 60 meV. Vypočítané fázové posuny a účinné průřezy ukazují dvě rezonance pod excitačním prahem $3s$, které nebyly zmíněné v předchozích pracích.

M. Tarana and R. Čurík, R-matrix calculations of electron collisions with a lithium atom at low energies, *Phys. Rev.*, 2019, A 99, 012708

Oddělení spektroskopie (2)

Predikce detekovatelných spektrálních pásů acetyleny na raných terestrických exoplanetách s redukčním typem atmosféry během raného bombardování asteroidy

Chemické prostředí na raných planetách je zřejmě významně ovlivněno impakty těles pohybujících se po nestabilních drahách v době následující po zhroucení protoplanetárního disku. Experimenty, teoretické modely planetárních atmosfér a simulace tranzitních spekter jednoznačně ukazují, že chemickým markerem impaktů asteroidů je acetylen mající jasné pásy v oblasti 3.05 and 12 μm .



Pozorování spekter acetyleny produkovaného impaktem do atmosféry exoplanety pomocí satelitu ARIEL. Spektrum mladé exoplanety bude pozorovatelné např. díky budoucí misi ESA satelitu ARIEL. Během tranzitu exoplanety bombardované asteroidy před mateřskou hvězdou spektrograf zaznamená spektrum její atmosféry, v níž bude rozpoznatelný pás acetyleny kolem vlnové délky 12 μm .

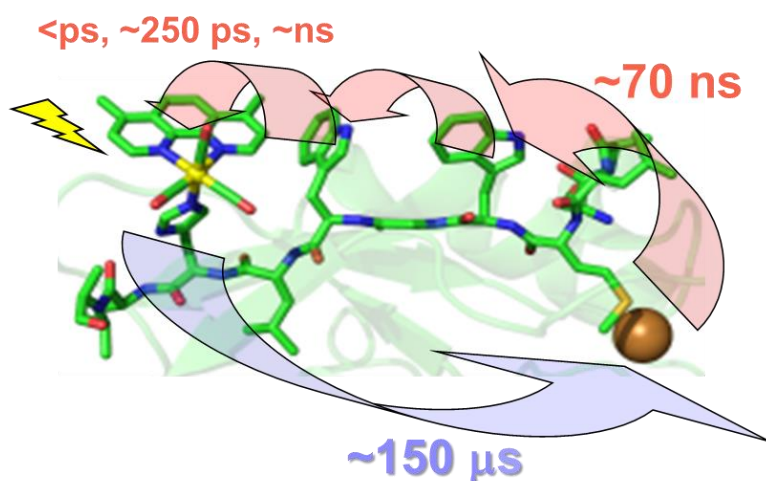
P. B. Rimmer, M. Ferus, I. P. Waldmann, A. Knížek, D. Kalvaitis, O. Ivanek, P. Kubelík, S. N. Yurchenko, T. Burian, J. Dostál, L. Juha, R. Dudžák, M. Krůs, J. Tennyson, S. Civiš, A. T. Archibald, A. Granville-Willet, Identifiable Acetylene Features Predicted for Young Earth-like Exoplanets with Reducing Atmospheres undergoing Heavy Bombardment, *Astrophysical Journal*, 2019, 888, 21.

Oddělení biofyzikální chemie (3)

Fotoindukovaná separace náboje v chromofor-proteinových systémech

Bylo prokázáno urychlení přenosu elektronu v proteinových (azurinových) mutantech s kovalentně vázaným fotooxidujícím organometalickým komplexem pomocí tryptofanových skupin. Zkonstruovali jsme proteinové (azurinové) mutanty s kovalentně vázaným fotooxidujícím organometalickým komplexem schopné oxidovat měďné centrum vzdálené 1.9 a 2.3 nm během 60 ns po ozáření postupným přenosem elektronu přes tryptofanové skupiny. Prokázali jsme, že tryptofan urychlí přenos elektronu $\sim 100\times$, dva tryptofany za sebou umožní až tisícinásobné urychlení. Experimentální a teoretický výzkum přenosu elektronu vytváří základy pro konstrukci fotoaktivních systémů založených na proteinech.

Spolupracující subjekt: Beckman Institute, California Institute of Technology, Pasadena, USA

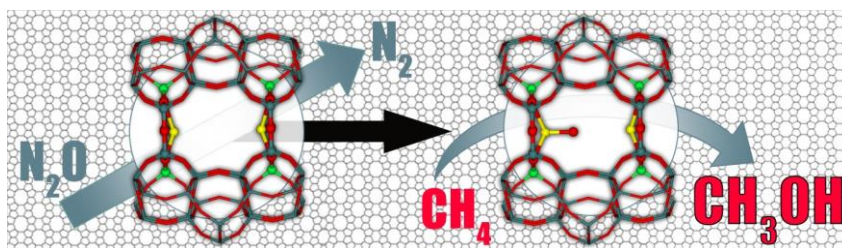


Dynamika přenosu elektronu v proteinových (azurinových) mutantech s kovalentně vázaným fotooxidujícím organometalickým komplexem. Časová sekvence přenosu elektronu z měďného centra na organometalický rheniový komplex. Šipky v horní části obrázku znázorňují postupné přeskoky přes tryptofanové skupiny na kovové centrum. Vyznačené hodnoty času označují dobu trvání jednotlivých kroků. Modrá šipka v dolní části obrázku s vyznačením času znázorňuje zpětný přenos elektronu a trvání toho procesu.

Takematsu, K.; Williamson, H. R.; Nikolovski, P.; Kaiser, J. T.; Sheng, Y. L.; Pospíšil, P.; Towrie, M.; Heyda, J.; Hollas, D.; Záliš, S.; Gray, H. B.; Vlček, A.; Winkler, J. R., Two Tryptophans Are Better Than One in Accelerating Electron Flow through a Protein, *Acs Central Science*, 2019, 5, 192.

Oddělení struktury a dynamiky v katalýze (4)**Binukleární kationtová centra - vysoce aktivní struktury pro selektivní oxidaci metanu na metanol**

Byl vyvinut nový, unikátní typ redoxních katalyzátorů s využitím nového typu katalytických center stabilizovaných v zeolitických maticích. Tato binukleární kationtová centra na bázi přechodových kovů jsou schopna již za pokojové teploty rozkládat molekulární kyslík nebo N_2O za vzniku vysoce aktivních oxidických specií, Ty jsou následně schopné za pokojové teploty selektivně oxidovat metan na metanol. Objev tohoto systému otevírá nové možnosti ve využití zemního plynu.



Binukleární kationtová centra v zeolitu. Redukované binukleární centrum stabilizované v matici zeolitu ferrierit a jeho oxidovaná forma vytvořená rozkladem molekulárního kyslíku.

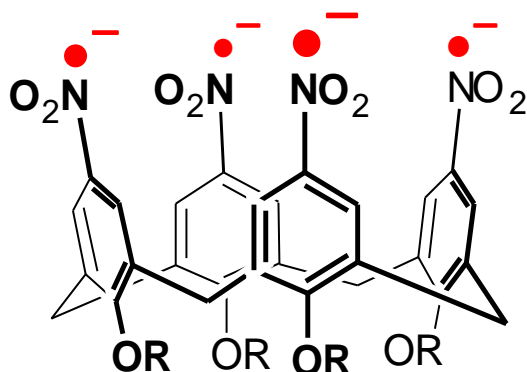
E. Tabor, M. Lemishka, Z. Sobalík, K. Mlekodaj, P. C. Andrikopoulos, J. Dědeček, S. Sklenák, Low-temperature selective oxidation of methane over distant binuclear cationic centers in zeolites, *Communications Chemistry*, 2019, 2, 71.

DOI: 10.1038/s42004-019-0173-9.

Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy (5)

Elektrochemicky generovaný ligand – zřejmě první publikovaný případ

Čtyř-elektronovou elektrochemickou redukcí cone-tetranitrocalix[4]arenu v DMF se podařilo získat stabilní tetradikál tetraanion. Pozitivní posun druhého redukčního potenciálu výchozího kalixarenu s rostoucí koncentrací kationtů alkalických kovů ukazuje na tvorbu komplexů. Tetradikál tetraanion výchozího tetranitrokalix[4]arenu je tedy prvním příkladem elektrochemicky generovaného ligandu, který je slibným receptorem/senzorem pro kationty těžších alkalických kovů (K, Rb, Cs). Byly stanoveny příslušné konstanty stability a stechiometrie. Imobilizace výchozích kalixarenů na povrch elektrody a jejich redukce nabízí nové aplikace v reverzibilní elektrosepaci iontů alkalických kovů v elektroanalytické chemii.



Struktura nového elektrochemicky generovaného polydentátního radikálového ligandu. Relativně velkou stabilitu pozorovaných komplexů M_4CX lze vysvětlit efektem zvaným „stereochemický vektor“, kdy čtyři negativně nabitě nitroradikály tvoří organizovaný systém fixovaný a orientovaný v prostoru, který zvyšuje elektrostatickou koordinační schopnost.

A. Liška, P. Vojtíšek, J. Ludvík, The cone-tetranitrocalix[4]arene tetradikál tetraanion as an electrochemically generated ligand for heavier alkali metal cations, *Chem. Commun.*, 2019, 55, 2817.

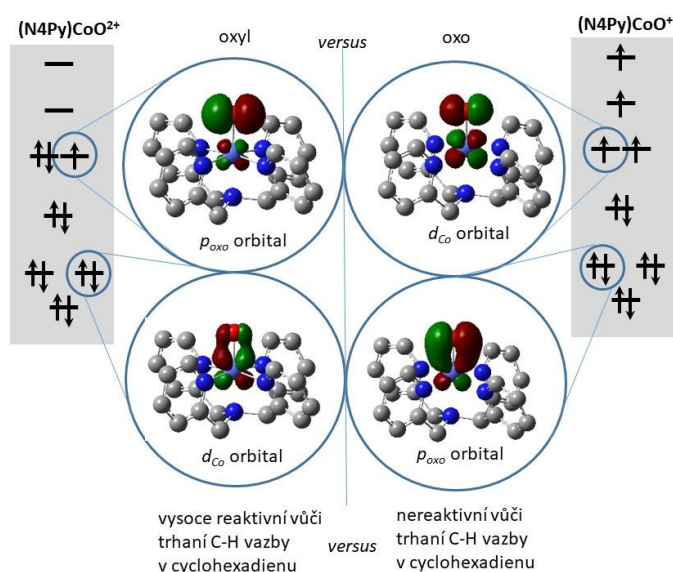
DOI: 10.1039/c8cc09662g

Oddělení výpočetní chemie (6)

Spektroskopické a katalytické vlastnosti komplexů s jednotkou Co(III)-oxyl a Co(III)-oxo vykazující schopnost aktivace nereaktivních vazeb C-H

Pomocí fotodisociační spektroskopie a multireferenčních výpočtů byla prozkoumána elektronová struktura komplexů s reaktivní jednotkou kobalt(III)-oxyl a kobalt(III)-oxo a demonstrována jejich vysoká schopnost trhat silné nereaktivní C-H vazby. Význam této práce spočívá v poukázání na schopnost kobaltu a skupiny oxo tvořit vazbu, což se dlouho nedařilo experimentálně uskutečnit a také na možnost modulovat vaznost mezi kobaltem a skupinou oxo, což má přímý dopad na reaktivitu této skupiny.

Spolupracující subjekt: Radboud University, Netherlands, prof. Jana Roithová



Elektronová struktura komplexu s reaktivní jednotkou kobalt (III)-oxyl (vlevo) a kobalt (III)-oxo (vpravo) a porovnání reaktivity obou komplexů vůči štěpení C-H vazby. Komplex vlevo má výrazný radikálový charakter s jedním nespárovaným elektronem na kyslíku (tj. oxylový charakter), zatímco elektron na kyslíku v komplexu vpravo je spárovaný s jiným elektronem (tj. oxidový charakter). Tento rozdíl se projevuje v rozdílné reaktivitě obou komplexů.

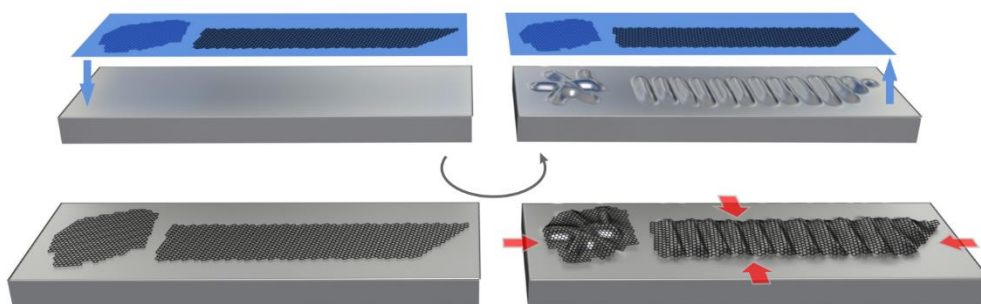
Andris E., Navrátil R., Jašík J., Srnc M., Rodríguez, M., Costas M., Roithová J., M-O Bonding Beyond the Oxo Wall: Spectroscopy and Reactivity of Cobalt (III)-Oxyl and Cobalt (III)-Oxo Complexes. *Angew. Int. Chem.*, 2019, 58, 9619.

Oddělení elektrochemických materiálů (7)

Modifikace struktury grafenu mechanickou deformací

Bylo dosaženo významných pokroků v kontrole struktury a povrchu grafenu pomocí permanentní mechanické deformace/tvarování substrátu – polymerních podložek v případě publikací 1. a 2. a litograficky připravených polí pilířů Si/SiO₂ v případě publikace 3.

Spolupracující subjekt: FORTH/ICE-HT Patras, IPHT Jena, FZÚ, MFF UK, FS ČVUT



Vzájemné tvarování grafenu na měkkém polymeru. Zahříváním nebo plasmovým opracováním měkkého polymeru byla vytvořena kontrolovaná deformační pole – vrásky v grafenu, které se zároveň otiskly do polymeru před jeho vytvrzením.

Sampathkumar K., Diez-Cabanes V., Kovaříček P., del Corro E., Bouša M., Hosek J., Kalbac M., Frank O., On the Suitability of Raman Spectroscopy to Monitor the Degree of Graphene Functionalization by Diazonium Salts, *J. Phys. Chem.*, 2019, C 123, 22397.

Sampathkumar K., Androulidakis C., Koukaras E. N., Rahova J., Drogowska K., Kalbac M., Vetushka A., Fejfar A., Galiotis C., Frank O., Sculpturing graphene wrinkle patterns into compliant substrates, *Carbon*, 2019, 146, 772.

Verhagen T., Pacakova B., Bousa M., Hübner U., Kalbac M., Vejpravova J., Frank O., Superlattice in collapsed graphene wrinkles, *Sci. Rep.*, 2019, 9, 9972.

Elektronově a děrově selektivní mezifází pro perovskitovou fotovoltaiku

Kompaktní tenké filmy z oxidických polovodičů (TiO₂, SnO₂) byly vyvinuty pro elektronově selektivní kontakty v perovskitovém solárním článku. Tyto filmy přenášejí elektrony z fotoexcitovaného perovskitu k proudovému sběrači, který je zhotoven z vodivého skla a zároveň brání rekombinaci těchto elektronů s vrstvou pohlcující světlo. Pro stejnou aplikaci v solárním článku byl vyvinut nový typ vodiče děr, založený na CuSCN a redukovaném oxidu grafenu. Tím bylo získáno zařízení dosahující téměř 20 % účinnosti.

Spolupracující subjekt: EPF-Lausanne, VŠCHT, FZÚ

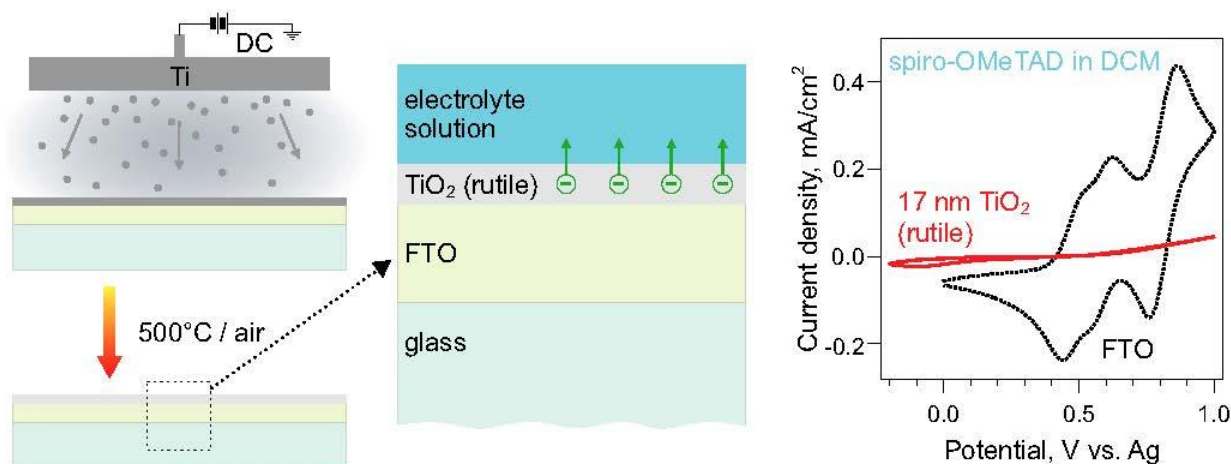


Schéma přípravy a elektrochemického testování tenkých filmů z TiO_2 rutilu. V prvním kroku se nanáší tenká vrstva titanu pomocí magnetronového naprašování. Ta se následně převede na TiO_2 rutil žháním na vzduchu při 500°C . Zcela vpravo je cyklický voltamogram spiro-OMeTAD v dichloromethanu, který dokumentuje perfektní blokační vlastnosti této vrstvy na podožce z F-dopovaného SnO_2 (FTO).

L. Kavan, Conduction Band Engineering in Semiconducting Oxides (TiO_2 , SnO_2): Applications in Perovskite Photovoltaics and Beyond, *Catal.Today*, 2019, 328, 50.

J. Krysa, H. Krysova, Z. Hubicka, S. Kment, J. Maixner, L. Kavan: "Transparent Rutile TiO_2 films Prepared by Thermal Oxidation of Sputtered Ti on FTO Glass", *Photochem. Photobiol. Sci.*, 2019,18, 891.

L. Kavan, Z. Vlckova-Zivcova, P. Hubik, N. Arora, M. I. Dar, S. M. Zakeeruddin, M. Grätzel, Electrochemical Characterization of CuSCN Hole-Extracting Thin Films for Perovskite Photovoltaics", *ACS Appl. Energy Mater.*, 2019,2, 4264.

H. Krysova, M. Zlamalova, H. Tarabkova, J. Jirkovsky, O. Frank, M. Kohout, L. Kavan, Rutile TiO_2 Thin Film Electrodes with Excellent Blocking Function and Optical Transparency, *Electrochim. Acta*, 2019, 321, 134685.

Pyridinporfrazinát kobaltu jako neplatinový mediátor elektrochemických reakcí oxidace a vylučování vodíku

Elektroda modifikovaná pyridinporfrazinátem kobaltu vykazuje elektrokatalytickou aktivitu v reakci oxidace vodíku a snížení přepětí vylučování vodíku ve srovnání s nemodifikovanou elektrodou. Oxidace vodíku na mediátoru pyridinporfrazinátem kobaltu představuje první ověřený průběh této reakce na porfrazinovém mediátoru bez přítomnosti prvků skupiny platinových kovů, s potenciálně významným dopadem pro vodíkovou energetiku.

M. Klusáčková, P. Janda, H. Tarábková, Hydrogen evolution reaction enhanced by water soluble metallopyridinoporphyrazine complex adsorbed on highly oriented pyrolytic graphite, *Internat. J. Hydrogen Energy*, 2019, 44, 11431.

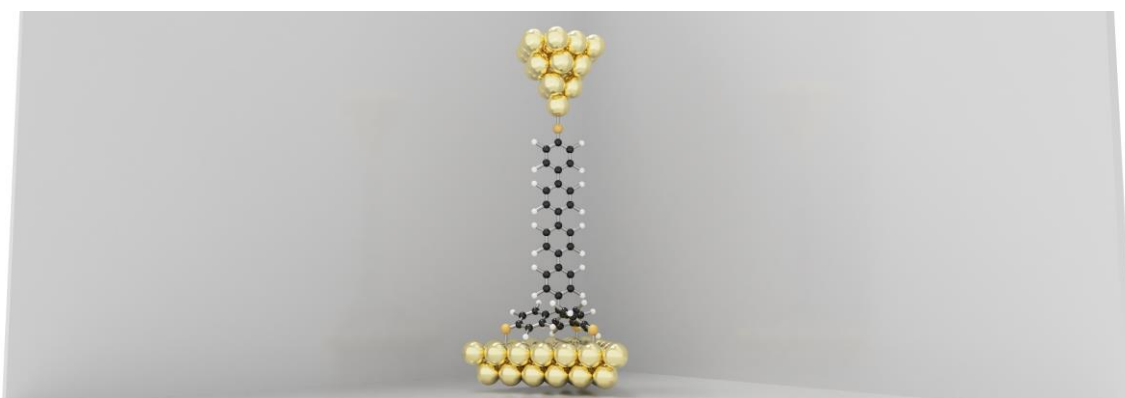
M. Klusáčková, H. Tarábková, P. Janda, Cobalt pyridinoporphyrazine film as a platinum group metal-free mediator in hydrogen electrochemistry, *Monatsh.Chem.*, 2019 150, 1643.

Oddělení elektrochemie v nanoměřítku (8)

Ladění kontaktní vodivosti molekul pro molekulární elektroniku

Molekulární elektronika vyžaduje ukotvení jednotlivých molekul na vodivém substrátu tak, aby bylo dosaženo co nejvyšší stability daných struktur. Zároveň by toto ukotvení nemělo limitovat požadovanou vodivost molekul. Unikátní měření vodivosti jednotlivých molekul v kombinaci s rozsáhlejší teoretickou studií jasně prokázalo, že princip tříbodového ukotvení molekulárního drátu je vhodným řešením tohoto problému.

Spolupracující subjekt: Karlsruhe Institute of Technology, Germany



Molekulární drát s tříbodovou kotvicí skupinou mezi dvěma zlatými elektrodami. Ilustrace znázorňuje molekulární drát s tříbodovou kotvicí skupinou umístěný mezi dvěma zlatými elektrodami v konfiguraci rastrovacího tunelového mikroskopu. Tříbodová kotvicí skupina umožňuje vysokou stabilitu molekulárních spojení, která je zapotřebí pro konstrukci funkčních prvků pro molekulárně-elektronické aplikace.

J. Šebera, M. Lindner, J. Gasió, G. Meszáros, O. Fuhr, M. Mayor, M. Valášek, V. Kolivoška, M. Hromadová, Tuning contact conductance of anchoring groups in single molecule junctions by molecular design, *Nanoscale*, 2019, 11, 12959.

Oddělení chemie iontů v plynné fázi (9)

Přidání rychlé plynové chromatografie k metodě hmotnostní spektrometrie v proudové trubici s vybranými ionty pro analýzu monoterpenů v plynných směsích

Metoda hmotnostní spektrometrie v proudové trubici s vybranými ionty se používá pro analýzu těkavých látek v plynu v reálném čase. Studie se zabývá možností rozšířit použitelnost metody také na isomerické molekuly, které touto metodou nelze pomocí SIFT-MS rozlišit pro jejich stejné atomární složení. Přidáním chromatografie používající krátkou kovovou kolonu a jejího přímého ohmického ohřevu bylo možné identifikovat molekuly monoterpenů, které pocházely z větviček různých jehličnatých stromů.

Spolupracující subjekt: Max-Planck-Institut für Chemie

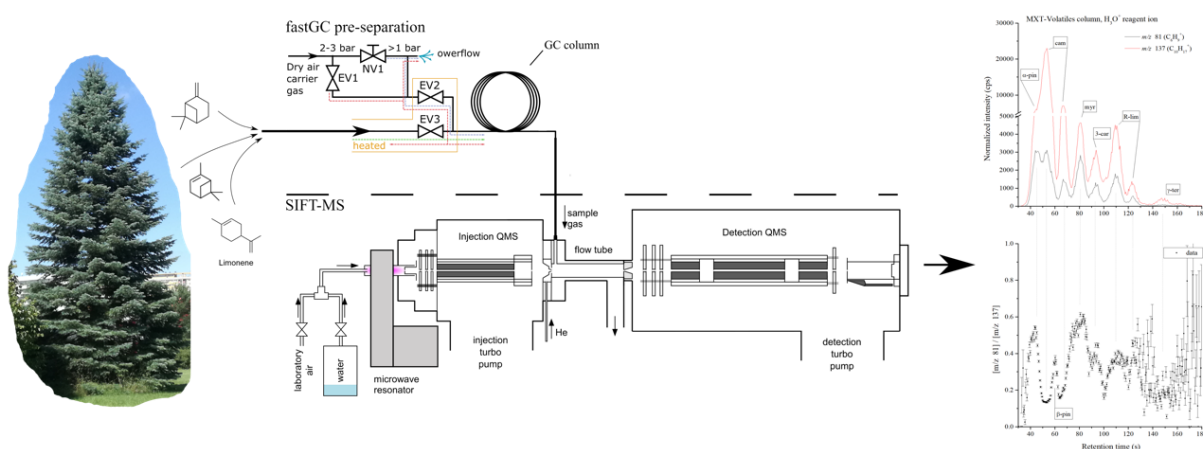


Schéma experimentu pro měření monoterpenů. Kombinace rychlé plynové chromatografie s metodou iontové chemie v proudové trubici a hmotnostní spektrometrie umožnila analýzu a identifikaci monoterpenů ve vzorkách několika jehličnanů.

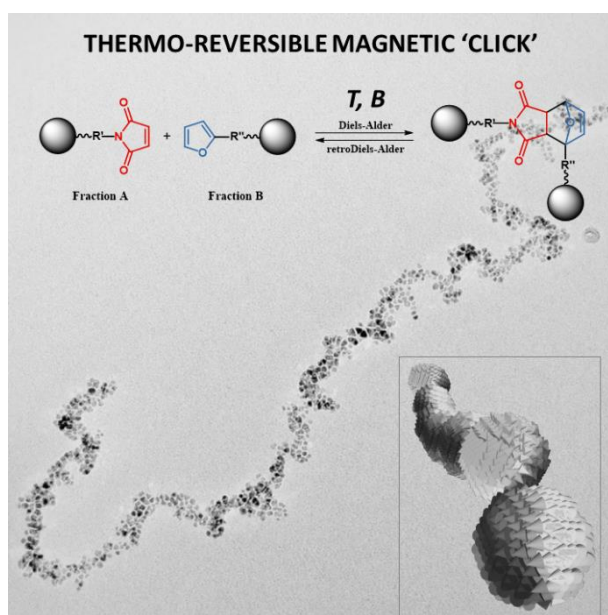
Lacko, M., Wang, N., Sovová, K., Pásztor, P., Španěl, P., Addition of fast gas chromatography to selected ion flow tube mass spectrometry for analysis of individual monoterpenes in mixtures. *Atmospheric Measurement Techniques*, 2019, 12, 4965.

Oddělení nízkodimenzionálních systémů (10)

Termoreverzibilní magnetické nanořetízky

Reverzibilní spojení nanomagnetů do organizovaných systémů je velmi zajímavé pro mnoho aplikací včetně terapeutických strategií *in vivo*. Zde jsme navrhli nový způsob založený na termoreverzibilní Diels-Alderově reakci (D–A) v přítomnosti externího magnetického pole, který umožňuje spojení magnetických nanočástic do úzkých řetízků dlouhých několik mikrometrů. Tyto řetízky mohou být navíc opět rozpojeny pomocí retro-D–A za vyšších teplot.

Spolupracující subjekt: Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova



Mikšátko, J., Aurélio, D., Kovaříček, P., Michlová, M., Veverka, M., Fridrichová, M., Matulková, I., Žáček, M., Kalbáč M., Vejpravová, J. Thermoreversible magnetic nanochains, *Nanoscale* 2019, 11, 16773-16780.

Vliv uhlovodíkových residuů na genotoxicitu kalcinovaného filmu tvořeného krystaly silikalitu-1

Studovali jsme silikalitový film (**SF**) z hlediska jeho aplikovatelnosti jako prosthetický materiál. Finálním krokem přípravy **SF** je jeho kalcinace, v důsledku které vznikají na jeho povrchu kondensované aromáty, zvyšující poškození kostních buněk. K užití **SF** jako prosthetického materiálu je proto nezbytná optimalisace jeho kalcinace. Ozařováním kalcinovaného **SF** vzniká singletový kyslík, jenž může být užít k jeho sterilisaci.

Spolupracující subjekt: Fyziologický ústav AV ČR, v. v. i.,

Ivan Jirka, Ivana Kopová, Pavel Kubát, Edyta Tabor, Lucie Bačáková, Milan Bouša and Petr Sajdl, Influence of Carbonaceous Residues on the Genotoxicity of Heat-Treated Silicalite-1 Film, *MATERIALS*, 2019, 12, 567.

DOI: 10.3390/ma12040567

Stabilní katalyzátory pro vylučování kyslíku v kyselém prostředí

Byl vyvinut nový typ oxidických katalyzátorů pro vylučování kyslíku v kyselém prostředí na bázi pyrochlorů Ru a Ir stabilizovaných lanthanidy. Nově připravené materiály mají aktivitu srovnatelnou s IrO₂ (průmyslový standard) ovšem převyšují jej svou stabilitou. Tento typ katalyzátorů snižuje poptávku pro IrO₂ v elektrolyzérch využívajících polymerní elektrolyt a to díky stabilizaci hojnějšího a aktivnějšího Ru.

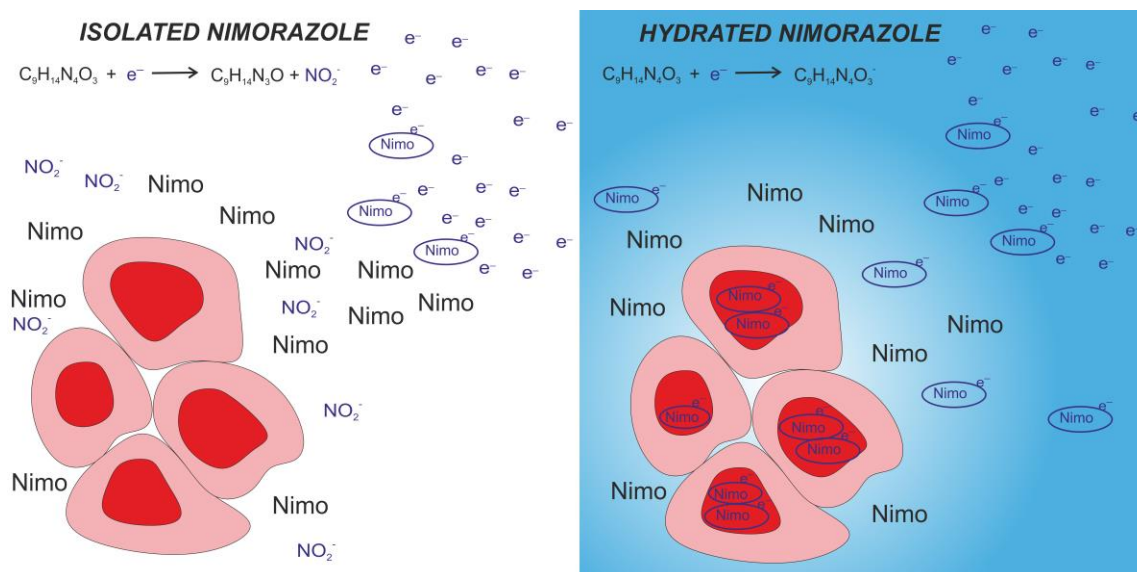
Spolupracující subjekt: PSI Villigen

Abbott, D. F., Pittkowski, R., Nebel, R., Minhová Macounová, K, Marelli, E., Fabbri, E., Castelli, I. E., Schmidt, T.J., Krtil, P., Design and Synthesis of Ir/Ru Pyrochlore Catalysts for the Oxygen Evolution Reaction Based on Their Bulk Thermodynamic Properties. [ACS Appl. Mater. Interfaces](#), 2019, 11, 37748.

Oddělení dynamiky molekul a klastrů (11)

Studie interakce elektronů s nízkou energií a hydratovaného nimorazolu

Metoda studia hydratovaných molekul ve vakuu vyvinutá na JHI byla v rámci mezinárodní studie použita k objasnění interakce elektronů s nimorazolem ve vodním prostředí. Nimorazol se využívá jako sensitizér v radiační terapii nádorových onemocnění. Studie publikovaná v *Nat. Comm.* ukazuje na stabilizaci aniontu nimorazolu, jenž umožňuje jeho akumulaci v buňkách. Studie vybrána za “Editors Highlight” mění zažitou představou o roli elektronů jako „rozbíječů“ vazeb v radiosensitizačním mechanismu.



Umělecký pohled na elementární procesy vysvětlující mechanismus účinku nimorazolu na základě prezentované studie. V prostředí s nízkoenergetickými elektrony může nimorazol disociovat za vzniku NO_2^- . Ve studii jsme ukázali, že ve vodním prostředí nimorazol nedisociuje a vytváří stabilní mateřský aniont. Tato změna může vysvětlit transport a akumulaci nimorazolu v rakovinových buňkách v hypoxických podmínkách.

Práce vznikla ve spolupráci s universitou Innsbruck a dalšími zahraničními pracovišti a klíčové experimenty a interpretace dat proběhly na odd. dynamiky molekul a klastrů.

R. Meißner, J. Kočišek, L. Feketová, J. Fedor, M. Fárník, P. Limão-Vieira, E. Illenberger, and S. Denifl, Low-energy electrons transform the nimorazole molecule into a radiosensitizer, *Nature Communications*, 2019, 10, 2388

DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-019-10340-8>.

Oddělení nanokatalýzy (12)

Založení oddělení a výbava nových laboratoří v roce 2019

V prvním roce nového oddělení byly vypracovány a zrealizovány komplexní plány pro opravy laboratorních místností pro účely plánovaných experimentů a přístrojů. V prosinci 2019 byly přípravné práce završeny přesunem kompletního přístrojového vybavení čtyř unikátních laboratoří z Argonne National Laboratory, USA, mimo jiné zahrnující dvě vysoce vakuové aparatury pro syntézu nanokatalyzátoru na bázi klastru a pět katalytických testovacích aparatur.

Spolupracující subjekt: Argonne National Laboratory and US Department of Energy



Klastrova laborator. Pohled na základní jednotky aparatur na přípravu klastru krátce po jejich nastehování.

Současně byly dokončeny publikace navazující na experimentální práci S. Vajdy.

Halder, M.-A. Ha, H. Zhai, B. Yang, M. J. Pellin, S. Seifert, A. N. Alexandrova, S. Vajda, Oxidative Dehydrogenation of Cyclohexane by Cu vs Pd Clusters: Selectivity Control by Specific Cluster Dynamics, *ChemCatChem.*, 2019, in press, (on-line Nov 4, 2019), Front Cover

DOI: 10.1002/cctc.201901795

Halder, A. Ngo, X. Luo, H.-H. Wang, J. G. Wen, P. Abbasi, M. Asadi, C. Zhang, D. Miller, D. Zhang, J. Lu, P. C. Redfern, K. C. Lau, R. Amine, R. S. Assary, Y. J. Lee, A. Salehi-Khojin, S. Vajda, K. Amine, L. A. Curtiss, In situ Formed Ir₃Li Nanoparticles as Active Cathode Material in Li-Oxygen Batteries, *J. Phys. Chem. A*, 2019, 123, 10047-10056

DOI: 10.1021/acs.jpca.9b06875

Y. Liu, N. Marcella, J. Timoshenko, A. Halder, B. Yang, L. Kolipaka, M. J. Pellin, S. Seifert, S. Vajda, P. Liu, A. I. Frenkel, Mapping XANES spectra on structural descriptors of copper oxide

clusters using supervised machine learning, *J. Chem. Phys.*, 2019, 151, 164201
Editor's Pick, Front Cover, DOI: 10.1063/1.5126597

Nejvýznamnější publikace:

Výsledky vědy a výzkumu dosažené pracovníky ústavu v roce 2019 byly publikovány ve 182 článcích v mezinárodních impaktovaných časopisech, 2 monografiích a 1 kapitole v knize, a jsou uvedeny v databázi ASEP:

<https://www.lib.cas.cz/arl/publikace/asep/ufch-w/gqz>

Tyto práce byly k datu vydání této zprávy již více než 410krát citovány. Pravidelně jsou na webových stránkách ústavu v rubrice ‚Aktuality – Významné publikace‘ zveřejňovány chronologicky vybrané publikace:

<https://www.jh-inst.cas.cz/node/2228>

Applied Organometallic Chemistry, 2019, e5318

Harmless glucose-modified ruthenium complexes suppressing cell migration of highly invasive cancer cell lines

Martin Lamač, Michal Horáček, Lucie Červenková Šťastná, Jindřich Karban, Lucia Sommerová, Hana Skoupilová, Roman Hrstka, Jiří Pinkas

DOI: 10.1002/aoc.5318.

Angewandte Chemie International Edition, 2019, 58, 17169–17174.

Straightforward Synthesis and Properties of Highly Fluorescent [5]- and [7]-Helical Dispiroindeno[2,1-c]fluorenes

Reinhard P.Kaiser, David Nečas, Timothee Cadart, Gyepes, Robert, , Ivana Císařová, Jiří Mosinger, Lubomír Pospíšil, Martin Kotora

DOI: 10.1002/anie.201908348

Applied Surface Science, 2019, 491, 16-23.

Non-destructive depth profile reconstruction of single-layer graphene using angle-resolved X-ray photoelectron spectroscopy

J. Zemek, J. Houdková, P. Jiříček, T. Ižák, Martin Kalbáč

Chemical Reviews, 2019, 119 (19), 10856-10915.

Quantum Chemistry in the Age of Quantum Computing

Yudong Cao, Jonathan Romero, Jonathan P. Olson, Matthias Degroote, Peter D. Johnson, Maria Kieferová, Ian D. Kivlichan, Tim Menke, Borja Peropadre, Nicolas P. D. Sawaya, Sukin Sim, Veis Libor, Alan Aspuru-Guzik.

Nanoscale, 2019, 11 (36), 16773-16780.

Thermoreversible magnetic nanochains

Jiří Mikšátko, Aurelio David, Petr Kovaříček, Magdaléna Michlová, Miroslav Veverka, Michaela Fridrichova, Irena Matulková, Martin Žáček, Martin Kalbáč, Jana Vejpravová

Electrochimica Acta, 2019, 318, 108-119.

Oxidation potentials of guanine, guanosine and guanosine-5'-monophosphate: Theory and experiment

Alan Liška, Iveta Třísková, Jiří Ludík, Libuše Trnková

Chemistry - A European Journal, 2019, 25 (52), 12068-12073.

Mechanochemical Pretreatment for Efficient Solvent-Free Synthesis of SSZ-13 Zeolite

Veronika Pashková, Kinga Mlekodaj, Petr Klein, Libor Brabec, Žouzelka Radek, Jiří Rathouský, Věnceslava Tokarova, Jiří Dědeček

The Journal of Chemical Physics, 2019, 151, 164201.

(Picture on Journal Front Cover)

Mapping XANES spectra on structural descriptors of copper oxide clusters using supervised machine learning

Yang Liu, Nicholas Marcella, Janis Timoshenko, Avik Halder, Bing Yang, Lakshmi Kolipaka, Michael. J. Pellin, Soenke Seifert, Štefan Vajda, Ping Liu, and Anatoly I. Frenkel

Chemical Communications, 2019, 55 (71), 10563-10566.

Prebiotic synthesis at impact craters: the role of Fe-clays and iron meteorites

Adam Pastorek, Jana Hrnčířová, Luboš Jankovič, Lukáš Nejd, Svatopluk Civiš, Ondřej Ivanek, Violetta Shestivska, Knížek Antonín, Petr Kubelík, Jiří Šponer, Lukáš Petera, Anna Křivková, Cassone, Giuseppe, Markéta Vaculovičova, Judit E.Sponer, Martin Ferus

Free Radical Biology & Medicine, 2019, 143:240-251.

Redox properties of individual quercetin moieties

E. Heřmánková, M. Zatloukalová, M. Biler, R. Sokolová, M. Bancířová, A. G. Tzakos, V. Křen, M. Kuzma, P. Trouillas, J. Vacek

Nanoscale, 2019, 11, 12959-12964.

Tuning the contact conductance of anchoring groups in single molecule junctions by molecular design

Jakub Šebera, Marcin Lindner, Jindřich Gasior, Gábor Mészáros, Olaf Fuhr, Marcel Mayor, Michal Valášek, Viliam Kolivoška and Magdaléna Hromadová

Nature Communications, 2019, 10, 2388.

Low-energy electrons transform the nimorazole molecule into a radiosensitiser

R. Meissner, J. Kočíšek, L. Feketeová, J. Fedor, M. Fárník, P. Limao-Vieira, E. Illenberger, S. Denifl

Angewandte Chemie International Edition, 2019, 58, 2 – 8.

M–O Bonding Beyond the Oxo Wall: Spectroscopy and Reactivity of Cobalt (III)-Oxyl and Cobalt(III)-Oxo Complexes

E. Andris, R. Navrátil, J. Jašík, M. Srnec, M. Rodríguez, M. Costas, J. Roithová

ACS Applied Materials & Interfaces, 2019, 11 (18), 16506-16516.

Selectivity Control of the Photo-Catalytic Water Oxidation on SrTiO₃ Nanocubes via Surface Dimensionality

K. M. Macounová, R. Nebel, M. Klusáčková, M. Klementova, P. Krtil

Analytical Chemistry, 2019, 91, 8, 5380-5388.

Electrostatic Switching and Selection of H₃O⁺, NO⁺, and O₂⁺ Reagent

Ions for Selected Ion Flow-Drift Tube Mass Spectrometric Analyses of Air and Breath

P. Španěl, A. Spesyvyi, D. Smith

Carbon, 2019, 146, 772-778.

Sculpturing graphene wrinkle patterns into compliant substrates, K. Sampathkumar, C. Androulidakis, E. N. Koukaras, J. Rahova, K. Drogowska, M. Kalbáč, A. Vetushka, A. Fejfar, C. Galiotis, O. Frank

The Journal of Physical Chemistry Letters, 2019, 10, 2024–2030.

Experimental Evidence of the Existence of Interleaflet Coupled Nanodomains: An MC-FRET Study

Ivo S. Vinklárek, Lukáš Vel'as, Petra Riegerová, Kristián Skála, Ilya Mikhalyov, Natalia Gretskaya, Martin Hof, and Radek Šachl

Chemical Communications, 2019, 55 (23), 3351-3354.

Probabilistic mapping of single molecule junction configurations as a tool to achieve the desired geometry of asymmetric tripodal molecules

Viliam Kolivoška, Jakub Sebera, Táňa Sebechlebská, Marcin Lindner, Jindřich Gasior, Gábor Mészáros, Marcel Mayor, Michal Valášek and Magdaléna Hromadová

Chemical Communications, 2019, 55 (19), 2817-2820.

The cone-tetranitrocalix[4]arene tetraanion as an electrochemically generated ligand for heavier alkali metal cations

Alan Liška, Pavel Vojtíšek, Jiří Ludvík

ChemSusChem, 2019, 12 (3), 556-576.

Tuning the Aluminum Distribution in Zeolites to Increase their Performance in Acid-Catalyzed Reactions

Jiří Dědeček, Edyta Tabor, Štěpán Sklenák

Journal of Chemical Theory and Computation, 2019, 15 (2), 803-812

Structure and Dynamics of the Hydration Shell: Spatially Decomposed Time Correlation Approach

Eva Pluhařová, Pavel Jungwirth, Matubayasi Nobuyuki, Maršálek Ondřej

Angewandte Chemie - International Edition, 2019, 58 (5), 1324-1328

Spatially Resolved Covalent Functionalization Patterns on Graphene

Leoš Valenta, Petr Kovaříček, Václav Valeš, Zdeněk Bastl, Karolina A. Drogowska, Timotheus A. Verhagen, Radek Cibulka, Martin Kalbáč

ACS Central Science 2019, 5 (1), 192-200.

Two Tryptophans Are Better Than One in Accelerating Electron Flow through a Protein
Kana Takematsu, Heather R Williamson, Pavle Nikolovski, Jens T. Kaiser, Yuling Sheng, Petr Pospíšil, Michael Towrie, Jan Heyda, Daniel Hollas, Stanislav Záliš, Harry B. Gray, Antonín Vlček, and Jay R. Winkler

Applied Catalysis B: Environmental, 2019, 240, 358-366.

Feasibility of application of iron zeolites for high-temperature decomposition of N₂O under real conditions of the technology for nitric acid production

Edyta Tabor, Galina Sadovská, Milan Bernauer, Petr Sazama, Jana Nováková, Vlastimil Fila, Tomas Kmjec, Jaro

III. 2 Významné projekty

V roce 2019 ústav řešil 8 výzkumných projektů s podporou zahraničních poskytovatelů a 95 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	56
MŠMT	21
TA ČR	7
AV ČR	6
MPO	3
MV	1
Ostatní	1
Zahraniční	8

Vybrané výzkumné projekty

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 VaVaI (2010 - 2019).

Portfolio provozovaných zařízení a expertíz poskytované NanoEnviCz pokrývá různé oblasti výzkumu nanomateriálů, povrchů a nanokompozitů, jakožto materiálů pro ochranu životního prostředí a další související aplikace.

Souhra lipidů, iontů a bílkovin a její role v dynamice a funkci buněčných membrán (GAČR-EXPRO), řešitel: Martin Hof, další účastník projektu UOCHB AV ČR.

Cílem projektu je představit nový pohled na těsně provázanou souhru mezi lipidy, ionty a proteiny, která významně ovlivňuje membránové procesy jako je buněčná signalizace a membránový transport. (2019-2023)

Vybrané strategické projekty

ERA chair, (akronym **J. Heyrovský chair**), řešitel: J. Hrušák, mezinárodní projekt v rámci programu EU (H2020), Poskytovatel: Evropská komise

Na pozici 'J. Heyrovský chair' nastoupil v lednu 2019 Dr. Štefan Vajda, a k tomuto datu vzniklo i samostatné Oddělení nanokatalýzy. V průběhu roku se podařilo obsadit většinu pozic vědeckého týmu oddělení experty s praxí ze zahraničních výzkumných organizací, k nimž se přidali také dva odborníci již působící na Heyrovského ústavu. Současně proběhla instalace aparatur ve dvou nově vybavených laboratořích. V oddělení zahájili magisterské a doktorandské práce i dva studenti a jedna studentka.

Rozvoj kapacit ÚFCH JH, v. v. i. pro výzkum a vývoj, řešitel: M. Kalbáč, Poskytovatel: MŠMT, RKV I.

Evropská komise vydala již před více než deseti lety doporučení Evropské charty pro výzkumné pracovníky a Kodexu chování pro přijímání výzkumných pracovníků (C&C, 2005/251/ES), v němž upřesnila soubor zásad ke zlepšení výzkumného systému. Implementování principů C&C ve výzkumných institucích je podporováno **strategií lidských zdrojů pro výzkumné pracovníky (HRS4R)**.

Na začátku roku 2019 se Heyrovského ústav oficiálně připojil k výzkumným organizacím, které získaly ocenění **HR Excellence in Research**, což ukazuje pokrok v harmonizaci naší politiky v oblasti lidských zdrojů s mezinárodními standardy a identifikuje jej jako excelentní pracoviště v kvalitě řízení a rozvoji lidských zdrojů ve vědě a výzkumu. Navíc je prvním ústavem AV ČR s tímto oceněním. Nyní postupně plníme cíle, které jsme si stanovili v Akčním plánu. Celý proces je opět kontrolován Řídícím a Monitorovacím výborem, který je složen ze zástupců vědců, administrativního a technického personálu. Po dvou letech zrevidujeme aktuálnost Akčního plánu a po dalších třech letech nás navštíví nezávislí experti, protože získání HR Award je nejen známkou kvality, ale i trvalým závazkem pro vytváření příznivých podmínek pro pracovníky ústavu.

V roce 2019 se nám podařilo splnit několik významných úkolů, které jsme si stanovili v akčním plánu HRS4R:

- Spustili jsme nové, moderní webové stránky ústavu.
- Nově vzniklé dokumenty vydáváme souběžně v českém i anglickém jazyce,
- Přeložili jsme několik směrnic a vnitřních řádů do anglického jazyka, revidujeme základní dokumenty ústavu, aby byly aktuální a dostupné i pro pracovníky bez znalosti češtiny.
- Vytvořili jsme manuály, které přispívají k transparentnosti v hodnocení vědecké práce, konkrétně Kritéria pro hodnocení vědecké práce, Atestační manuál, Manuál pro atestační komisi; dále také Příručku pro zaměstnance.

- Atestace vědeckých pracovníků proběhly v roce 2019 již v souladu s doporučením Mezinárodního poradního orgánu, který byl jmenován ředitelem ústavu, a který se skládá z renomovaných vědců s bohatou zkušeností v oblasti tzv. science leadership.

- Vydali jsme unifikovanou předlohu pro inzerování volného vědeckého pracovního místa. Zkušenosti z průběhu výběrových řízení na otevřené pozice nového oddělení nanokatalýzy, která proběhla v souladu s principy Evropského výzkumného prostoru ERA, tzv. *Open, Transparent & Merit-Based Policy*, byly použity při tvorbě nové metodologie výběru vědeckých pracovníků.

- Proběhla řada školení rozvíjející vědomosti a dovednosti pracovníků ve vícero oblastech zájmu. Zmíňme školení členů konkurzní komise, školení vedoucích týmů pro výběrová řízení, manažerská školení pro vedoucí pracovníky, nebo výuku anglického jazyka pro členy ekonomického oddělení.

Více informací naleznete na tomto odkazu:

<https://www.jh-inst.cas.cz/cs/zakladni-stranka/strategie-lidskych-zdroju-pro-vyzkumne-pracovniky-hrs4r>

ESFRI Evropskému strategickému fóru pro výzkumné infrastruktury předsedá od 1. 1. 2019 zaměstnanec našeho ústavu RNDr. Jan Hrušák, CSc., který byl zvolen během 65. plenárního zasedání ESFRI na období dvou let s možností prodloužení o jeden rok. Působíště předsedy a jeho sekretariát se nachází v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i. v Praze 8.

V rámci svého mandátu Jan Hrušák koordinuje strategickou diskuzi k hlavním prioritám pro evropské výzkumné infrastruktury po roce 2020 a připravuje proces aktualizace Cestovní mapy ESFRI, která bude dokončena na konci roku 2021. Činnost sekretariátu předsedy ESFRI je podpořena Evropskými projekty StR-ESFRI a StR-ESFRI II z Horizontu 2020 na základě konsorciální dohody ve výši 283 375.00 EUR a projektem Ministerstva školství mládeže a tělovýchovy (MŠMT) v rámci programu mezinárodní spolupráce ve výzkumu a vývoji INTER-EXCELLENCE, podprogramu INTER-INFORM, z projektu CZERA 3, jehož aktivity naplňuje Národní informační centrum pro evropský výzkum (NICER) Technologického centra AV ČR.

Jan Hrušák byl také jmenován nezávislým expertem řídicího výboru pro vytvoření Evropského cloudu pro otevřenou vědu European Open Science Cloud (EOSC), gigantické servisní infrastruktury kombinující distribuovaná úložiště dat ze všech vědních disciplín, výpočetních kapacit HPC a dalších servisních infrastruktur. EOSC patří k jedné z největších výzev současné evropské vědní politiky. Řídicí výbor EOSC se schází téměř každý měsíc. Současně patří Jan Hrušák mezi členy Výboru pro evropský výzkumný prostor a inovace (ERAC), který vytváří evropskou politiku ve vědě a výzkumu. Jako autor přispěl do publikace OECD „Reference Framework for Assessing the Scientific and socio-economic impact of Research infrastructures,“ vydané v březnu 2019.

Činnost předsedy ESFRI představuje pro Českou republiku nejen prestižní reprezentaci, ale také napomáhá formování a směřování české politiky v oblasti VaVaI v Evropě. Podpůrný tým předsedy ESFRI se na ústavu J. Heyrovského podílí nejen na odborné přípravě podkladů pro jednání ke všem aspektům ESFRI a EOSC, ale umožňuje také v interakci s Technologickým

centrem a MŠMT při vypracovávání pozic České republiky a projekci politik Evropské unie do agend České republiky v oblasti výzkumu, např. i strukturálních fondů.

III. 3. Významná ocenění

Následující vědeckí pracovníci a studenti byli v roce 2019 oceněni za výsledky své výzkumné činnosti:

Mgr. Juraj Fedor, Ph.D. - Cena Učené společnosti ČR v kategorii „mladší vědecký pracovník“ za významný vědecký přínos k experimentálnímu studiu interakcí elektronů s molekulami, udělila Učená společnost ČR.

doc. RNDr. Lubomír Pospíšil, CSc. - Cena firmy Metrohm za celoživotní přínos k elektroanalytické chemii, konkrétně za přínos k využití polarografie při objasňování významných fyzikálně-chemických procesů, udělila společnost Methrom.

prof. RNDr. Ladislav Kavan, CSc., DSc., prof. RNDr. Jiří Ludvík, CSc., prof. RNDr. Zdeněk Samec, DrSc. - Pamětní medaile za důležité příspěvky k oboru elektrochemie udělila Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy při příležitosti 60. výročí udělení Nobelovy ceny prof. Jaroslavu Heyrovskému. Ocenění předal děkan fakulty prof. RNDr. Jiřího Zimy, CSc.

doc. RNDr. Ing. Martin Kalbáč, Ph.D. - Ocenění Premium Academiae pro vynikající vědecké osobnosti, které jsou nositeli výzkumu na špičkové mezinárodní úrovni, Udělila předsedkyně AV ČR prof. Eva Zažímalová.

Ing. Daniel Bím, Ph.D. - Cena Doctorandus za přírodní vědy v soutěži Česká hlava. Udělila iniciativa Česká hlava.

Mgr. Adéla Melcrová, Ph.D. - Cena Josefa Hlávky, která je určena pro talentované studenty v bakalářském, magisterském nebo doktorském studiu, kteří prokázali výjimečné schopnosti a tvůrčí myšlení ve svém oboru, a pro mladé talentované vědecké pracovníky Akademie věd ČR do 33 let jejich věku. Udělila Hlávková nadace.

Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D., RNDr. Viliam Kolivoška, Ph.D., MBA a Ing. Petr Kovaříček, Ph.D. - Prémie Otto Wichterleho vybraným, mimořádně kvalitním a perspektivním vědeckým pracovníkům AV ČR, kteří přispívají vynikajícími výsledky k rozvoji vědeckého poznání, udělila předsedkyně AV ČR prof. Eva Zažímalová.

Archiv všech ocenění lze nalézt na stránce ústavu pod odkazem:

<https://web.jh-inst.cas.cz/cs/prizes>

III. 4. Propagace a popularizace

Spolupráce ústavu s médii v jejich nejrůznější podobě na popularizaci výsledků činnosti vědců probíhá celoročně. V první polovině roku 2019 ústav prezentoval své výsledky veřejnosti prostřednictvím tiskových zpráv generovaných ve spolupráci s agenturou PR Konektor. K 30. červnu byla spolupráce s agenturou PR Konektor ukončena a od 1. září byl na pozici PR manažera přijat nový zaměstnanec. I v důsledku těchto strukturálních změn se podařilo obnovit úzkou spolupráci s Odborem mediální komunikace Kanceláře Akademie věd ČR v oblasti medializace výsledků výzkumu a popularizaci vědy cílové skupině, kterou je především laická veřejnost.

Výzkumná činnost vědců ústavu byla v průběhu roku 2019 pravidelně prezentována veřejnosti prostřednictvím popularizačních článků v denním tisku, časopisech, internetových serverech, ale i formou rozhovorů v rozhlase a televizi. V médiích byly takto uveřejněny desítky článků, rozhovorů a reportáží. Výběr těch nejvýznamnějších mediálních výstupů je veřejně dostupný na webových stránkách ústavu;

<http://web.jh-inst.cas.cz/media>.

Ústav též v průběhu roku 2019 vydal celkem 12 tiskových zpráv, zpracovávajících výsledky výzkumu a významné události přímo se týkající Heyrovského ústavu. Všechny tiskové zprávy v plném znění i s následnými ohlasy v médiích jsou pravidelně zveřejňovány na webových stránkách ústavu;

<https://web.jh-inst.cas.cz/cs/press-releases>

Speciální pozornost byla věnována 60. výročí udělení Nobelovy ceny prof. Jaroslavu Heyrovskému, českému vědci a zakladateli Polarografického ústavu, předchůdce Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského za objev nové analytické metody polarografie. Při této příležitosti ústav uspořádal slavnostní setkání, za účasti předsedkyně AV ČR, rektorů českých vysokých škol a dalších významných hostů. Na toto setkání navázalo slavnostní otevření laboratoří Oddělení nanokatalýzy.

Popularizace výsledků VaV prostřednictvím programů pro zájemce o přírodní vědy:

V roce 2019 uspořádal ústav 120 popularizačních a vzdělávacích akcí/programů pro studenty VŠ, žáky SŠ a ZŠ, předškoláky MŠ a zájemce z široké veřejnosti, které navštívilo celkem 8 550 návštěvníků.

Podrobný harmonogram programů roku 2019 pod názvem *60 let Nobelovky 2019* je archivován ve webové aplikaci popularizačního projektu Tři nástroje s adresou

<http://www.3nastroje.cz/detail.php?p=50>

Přehled nejvýznamnějších popularizačně-vzdělávacích programů a akcí roku:

O festivalu *Týden vědy a techniky TVT 2019* vědci ÚFCH JH připravili pro veřejnost setkání s vědou a výzkumem v podobě různých programů rozprostřených celkem do 5 různých dnů. Vznikla pestrá ochutnávka vědy, kterou navštívilo celkem 360 zájemců

Pro žáky a pedagogy středních škol pokračoval program *Den (s) vědcem* zahrnující workshopy, praktická měření či popularizační přednášky a exkurze. Žáci ze základních či mateřských škol z celé ČR absolvovali workshopy *Chemie není nuda* (2. stupeň ZŠ) nebo

chemická divadla představující chemii a profesi vědce pod názvem *Posvit' si citronem na duhu* (1. stupeň ZŠ a předškoláci MŠ). Zájemci o chemii navštěvovali dva chemické kroužky (celkem 25 dětí, 1x měsíčně 3 hodiny). Zájemcům z veřejnosti byl také věnován program sobotních workshopů (1x měsíčně) pod názvem *Cesta za nobelovkou*. 35 dětí ve věku 5–15 let mělo opět možnost seznámit se s chemií a fyzikou prostřednictvím experimentování v naší EDU učebně a laboratoři.

24 středoškoláků ze 17 škol z celé ČR navštívilo tradiční týdenní srpnovou školu (19. – 23. 8. 2019) *NANOškola 2019*, která byla již počtvrté podpořena projektem MŠMT v programu Podpory nadaných žáků SŠ a ZŠ (projekt 0033/7/NAD/2019).

Celoroční stáže v projektu *Otevřená věda AV ČR 2019* v ústavu absolvovalo 15 středoškoláků. Dalších 23 středoškoláků docházelo do ústavu na své mimoškolní stáže (s podporou projektu MŠMT 0038/7/NAD/2019v programu Podpory nadaných žáků SŠ a ZŠ), či zde studenti vykonali odborné praxe (7 studentů několika pražských škol či SPŠCH z Ostravy). V rámci tohoto projektu proběhl i týdenní kurz chemických experimentů s názvem *Neon v Boru*, kterého se účastnilo 10 středoškoláků.

Ústav se i nadále podílel na vzdělávání studentů středních škol v rámci 2 projektů *Šablony SŠ* v programu *OP VVV* (strukturální fondy MŠMT) řešených Masarykovou střední školou chemickou (MSŠCH) z Prahy 1 a Biskupským gymnáziem (BiGy) ze Žďáru nad Sázavou.

V roce 2019 ústav uspořádal celkem 10 výstav: 5 x vlastní putovní výstavu *Příběh kapky* připomínající vědce Jaroslava Heyrovského (28. výstava ve Strakonících, 29. a 31. výstava proběhla v Praze, jednak týden v ÚFCH JH a jednak krátké jednodenní zastavení části výstavy v Karolinu UK u příležitosti slavnostního připomenutí 60. výročí udělení Nobelovy ceny J. Heyrovskému (10. 12. 2019), 30. výstava ve Frýdku-Místku). Virtuální podoba výstavy, která trvá od roku 2009, a za celou dobu jejího trvání ji navštívilo okolo 31 000 návštěvníků, je aktualizována na její webové stránce s adresou <http://www.heyrovsky.cz>). V ústavní komorní Galerii 4P proběhly samostatné výstavy s různou tematikou: tradiční každoroční výstava prací vědců z ústavu s názvem *Nejen prací živ je vědec*, výstava *Svět podle Hieronyma Bosche* (od *Svatopluka Civiše*, která proběhla 2x: jednou v Galerii 4P a jednou v Gymnáziu Botičská v Praze 2), výstava *Jiří Suchý: Grafiky* (viz obr.) a výstava fotografií *Josef Zoser: Tiché návraty*.



Výstavy v prostoru vestibulu ústavu, zvaném *Galerie 4P*, jsou příležitostí k setkání vědy a umění.

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

Ústav se v roce 2019 podílel na školení **55 doktorandů** (v prezenční a kombinované formě studia; z tohoto počtu v průběhu roku 2019 jich obhájilo disertační práci 12); **18 vysokoškolských studentů** 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 2019 uskutečnila v konferenčním centru AV ČR v zámku Liblice (29. - 30. dubna 2019). Své prezentace, převážně v anglickém jazyce, předneslo 27 VŠ studentů (z toho 5 zahraničních) a 1 středoškolačka. Konference se dále v roli posluchačů zúčastnilo téměř 30 vědců ústavu. Studentské příspěvky shrnuje sborník:

<https://www.jh-inst.cas.cz/index.php/scientific-meetings/student-seminar-of-jhi-2019>

Na **výuce** studentů bakalářského, magisterského a DSP studia (postgraduální studenti) se **na desítky vysokých škol** podílely tři desítky vědeckých a odborných pracovníků ústavu a v průběhu *letního/zimního* semestru bylo celkem odpřednášeno *589/1179* hodin v *19/49* semestrálních cyklech přednášek, seminářů a cvičení.

15 vědeckých pracovníků bylo v roce 2019 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, MFF UK v Praze, ČVUT v Praze, VŠCHT v Praze, Univerzita Pardubice, Masarykova Univerzita v Brně, Palackého Univerzita v Olomouci, Jihočeská Univerzita v Českých Budějovicích).

Pracovníci ústavu v roce 2019 opět úspěšně spolupracovali na řešení **27 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, exkurze, workshopy, stáže a praxe). Pro středoškolskou mládež bylo v roce 2019 předneseno celkem 54 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 (celkem téměř dvacítky prací). 3 studenti se probojovali až do celostátního kola SOČ. Jeden student obsadil v oboru Fyzika 2. místo a jedna studentka v oboru Zdravotnictví obsadila 3. místo.

V roce 2019 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 2019*), 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*), aktivně ústav řeší některé společné projekty se středními školami.

Popularizaci výsledků VaV se věnují pravidelně aktualizované stránky s adresou <http://www.3nastroje.cz> či <http://www.heyrovsky.cz>.



Vzdělávací programy: Paletu chemických programů od divadla pro mateřské školy, přes workshopy a kroužky pro žáky ZŠ až po celodenní programy s přednáškami, workshopy a praktikami v laboratořích pro středoškoláky pořádaných po celý školní rok doplňují prázdninové programy: týdenní nanoškola a chemický kurz Neon v Boru a programy workshopů pro žáky příměstských či letních táborů. Na své odborné stáže jezdí do ústavu středoškoláci z celé České republiky a jejich lektory je více než dvacítka vědců a doktorandů z ústavu.

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

Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané řešením projektu

V roce 2019 ústav řešil 7 projekty v rámci spolupráce s podnikatelskou sférou.

Analýza a kvantifikace výbojových produktů plynu Novac 4710

Program: Náhrada plynu SF₆ v rozvaděčích

Výsledek: Identifikace a kvantifikace výbojových produktů plynu Novac 4710

Uplatnění: Znalost plazmochemie při parciálním výboji vo vyskonapětových rozvaděčích naplněných tímto plynem.

Poskytovatel: TAČR

Partnerská organizace: Eaton Elektrotechnika s.r.o.

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

Program: Výzkum a návrh konstrukce 48V lithiových akumulátorů pro automobilový průmysl/program TRIO

Výsledek: 1) Optimalizovaný NMC materiál s morfologií dutých koulí byl použit jako katoda v bateriovém modulu o teoretické kapacitě 121.7 Ah a energii 450.5 Wh. Testovaná baterie po 10 formátovacích cyklech poskytovala 78.3% teoretické kapacity a 73% teoretické energie a po více než 200 nabíjecích/vybíjecích cyklech rychlostí C/10 vykazovala stabilní fungování. 2) Elektrochemické testování NMC materiálů s vyšší koncentrací NiO potvrdilo větší ztráty kapacity/energie při formátování v důsledku vyšší reaktivity Ni⁴⁺ během nabíjení.

Poskytovatel: MPO ČR

Partnerská organizace: HE3DA, s.r.o.

Publikace: M. Zukalova, J. Prochazka, A. Zukal and L. Kavan, Electrochemical Performance of Li_{Nix}MnyCozO₂ (NMC) Materials with Hollow Spheres Morphology, ECS Trans, 95(1), 55-63 (2019). DOI: 10.1149/09501.0055ecst

Inovativní fotokatalytické betony a betonové stěrky

Program: Inovativní fotokatalytické stěrky a přísady do betonu

Výsledek: Inovativní fotokatalytické betony a betonové stěrky se solárním samočisticím a antimikrobiálním efektem

Uplatnění: Společnost Betosan, s. r. o., řešitel společného projektu FV20234, plánuje výrobu a budoucí uplatnění vyvinutých materiálů ve stavebnictví.

Poskytovatel: MPO ČR

Partnerská organizace: Společnost Betosan, s. r. o.

Publikace: 2 přihlášky užitečných vzorů

Inovativní nanokompozitní nátěry s fotokatalytickou samočisticí a desinfekční funkcí

Program: Fotoaktivní nanokompozitní systémy pro zlepšení životního prostředí

Výsledek: Koloidní soustava na bázi nanočástic oxidu titaničitého a oxidu křemičitého pro fotokatalytickou samočisticí a desinfekční povrchovou úpravu historických staveb a jiných památkových objektů

Uplatnění: Společnost BAL Teluria, s. r. o., řešitel společného projektu TH04030090, plánuje uplatnění vyvinutých materiálů pro preventivní povrchové ošetření historických staveb a jiných památkových objektů

Poskytovatel: TA ČR

Partnerská organizace: Společnost BAL Teluria, s. r. o.

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

Ústav v roce 2019 pokračoval v plnění závazků 4 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.

Vliv délky řetězců nepolárních lipidů na stabilitu lipidové vrstvy slizního filmu – počítačové modelování

Zadavatel: Santen SAS, Francie

Anotace: V rámci počítačového modelování jsme vysvětlili mechanismus destabilizaci slizního filmu za přítomnosti nepolárních lipidů o krátkých řetězcích.

Uplatnění: Pomoc v projektování a vývoji oftalmologických léků

Výroba zeolitu SSZ-13 s mechanochemickou aktivací

Zadavatel: UNICRE a.s.

Anotace: Byl vyvinut postup syntézy zeolitu SSZ-13 bez použití rozpouštědla (vody) pomocí mechanochemické aktivace syntézní směsi.

Uplatnění: Použití tohoto postupu výrazně zvyšuje výtěžek syntézy zeolitického katalyzátoru a zároveň snižuje její dopady na životní prostředí.

Publikace: Mechanochemical Pretreatment for Efficient Solvent-Free Synthesis of SSZ-13 Zeolite, V. Pashkova, K. Mlekodaj, P. Klein, L. Brabec, R. Žouželka, J. Rathouský, V. Tokarová, J. Dědeček, Chemistry – A European Journal 25 (2019) 12068-12073.

Charakterizace plasmaticky modifikovaných povrchů polymerních materiálů metodou XPS

Zadavatel: ČVUT, Fakulta strojní

Anotace: Spektroskopií XPS bylo určeno povrchové složení a populace kyslík obsahujících funkčních skupin u serie 21 vzorků připravených plasmatickým opracováním povrchu za různých experimentálních podmínek.

Uplatnění: Výsledky slouží k optimalizaci podmínek plasmatických modifikací povrchů polymerních materiálů mikrovlnným plasmatem za účelem vývoje nových kompozitů pro beztlakové technologie 3D tisk, rotomoulding ad.

Hodnocení nanomorfologie povrchu korozní vrstvy vzorků Zr slitin metodou AFM

Zadavatel: ÚJP PRAHA a.s.

Anotace: Při posuzování korozních vlivů prostředí odpovídající reaktoru VVER na nanomorfologické změny povrchu Zr-slitinových trubek pro ukládání jaderného paliva.

Uplatnění: Při posuzování korozních vlivů prostředí odpovídající reaktoru VVER na nanomorfologické změny povrchu Zr-slitinových trubek pro ukládání jaderného paliva.

Společné projekty výzkumu a vývoje podpořené z veřejných prostředků

V roce 2019 byly uděleny 2 patenty a 1 užitný vzor.

Patent

Způsob výroby porézní diamantové vrstvy a tlustá porézní diamantová vrstva vyztužená nanovláknny

Předložený vynález popisuje způsob výroby porézní diamantové vrstvy a porézního diamantového tělesa vyztuženého nanovláknny. Tento způsob přípravy zahrnuje krok očkování nanočástic diamantu do nanovláken z jakéhokoliv materiálu schopného odolávat podmínkám plazmou podporovaného ukládání.

Datum udělení patentu: 12. 6. 2019

Původce: V. Mortet, Vincent, A. Taylor, L. Kavan, O. Frank, Z. Vlčková Živcová, H. Krýsová, V. Petrák

Využití: Diamantové vrstvy pro průmyslové aplikace a elektrody s vysokým povrchem, např. pro čištění vody nebo pro superkondenzátory.

Patent

Způsob výroby zeolitu SSZ-13 s mechanochemickou aktivací

Byl vyvinut postup syntézy zeolitu SSZ-13 bez použití rozpouštědla (vody) pomocí mechanochemické aktivace syntézní směsi.

Datum udělení patentu: 4. 12. 2019

Původce: V. Pashková, K. Mlekodaj, J. Dědeček, V. Tokarová

Využití: Použití tohoto postupu výrazně zvyšuje výtěžek syntézy zeolitického katalyzátoru a zároveň snižuje její dopady na životní prostředí.

Užitný vzor

Cyklopentadienyl-arenové komplexy ruthenia pro přípravu léčiv potlačujících migraci a invazivitu nádorových buněk

Předložené řešení se zabývá komplexy ruthenia s arenovým a cyklopentadienylovým ligandem a jejich použití k přípravě léčiv použitelných pro léčbu nádorových onemocnění. Hlavním předpokládaným účinkem je potlačení migrace a invazivity rakovinových buněk u vybraných typů invazivních nádorů (karcinom vaječníku, karcinom prsu a dalších).

Datum udělení: 19. 2. 2019

Původce: R. Hrstka, L. Sommerová, J. Pinkas, J. Karban

Využití: Jako potenciální preadjuvantní léčivo k potlačení tvorby metastáz při léčbě nádorových onemocnění.

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

RNDr. Jan Hrušák, CSc. Název organizace: Mezinárodní organizace Evropské strategické fórum pro výzkumné infrastruktury (ESFRI) Funkce: Předseda, funkční období: 2019-2021

Mgr. 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: Executive Secretary. Funkční období: 2019-2023

III. 7. Mezinárodní vědecká spolupráce

V rámci mezinárodní spolupráce pracoviště řešilo celkem 8 projektů financovaných Evropskou komisí v rámci programu Horizont 2020. Dále se ústav účastnil ve 12 mezinárodních projektech, které byly řešené v rámci mezinárodní vědecké spolupráce mimo rámcových programů EU a mimo projektů strukturálních fondů.

Projekty financované Evropskou komisí v programu HORIZONT 2020

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

Trans-Spin NanoArchitectures: from birth to functionalities in magnetic field (akronym TSuNAMI), koordinátor: Karlova Univerzita v Praze, řešitel: doc. 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.

ERA chair at J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry AS CR-The institutional approach towards ERA, (akronym Heyrovsky Chair), koordinátor: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského (Česká republika), řešitel RNDr. Jan Hrušák, CSc.. Součástí projektu je mezinárodní poradní sbor. Projekt byl zahájen v roce 2018 a pokračuje v řešení do roku 2023.

Transformative Chemistry for Sustainable Energy Future (Akronym: Energy-X), koordinátor: The Technical University of Denmark, řešitel: doc. Ing. Petr Krtil, Ph.D. Projekt byl zahájen v roce 2019 a pokračuje v řešení do roku 2020.

Proton Transport and Proton-Coupled Transport (Akronym: PROTON), koordinátor: Peter Pohl, řešitel: prof. Martin Hof, Dr. rer.nat, DSc. Projekt byl zahájen v roce 2019 a pokračuje v řešení do roku 2023.

Solar Energy for Circular Economy (Akronym: SUNRISE), koordinátor: University of Leiden, řešitel: prof. RNDr. Antonín Vlček, CSc. Projekt byl zahájen v roce 2019 a pokračuje v řešení do roku 2020.

Suport to Reinforce the European Strategy Forum on Research Infrastructures (Akronym: StR-Esfrí2), koordinátor: United Kingdom Research and Innovation, řešitel: RNDr. Jan Hrušák, CSc. Projekt byl zahájen v roce 2017 a pokračuje v řešení do roku 2022.

Mezinárodní projekty, které byly řešené v rámci mezinárodní vědecké spolupráce mimo rámcových programů EU

PŘEHLED MEZINÁRODNÍCH PROJEKTŮ, KTERÉ PRACOVIŠTĚ ŘEŠÍ V RÁMCI MEZINÁRODNÍ VĚDECKÉ SPOLUPRÁCE

Poskytovatel	Počet projektů
INTER-EXCELLENCE (MŠMT) podprogram INTER-ACTION	2
INTER-EXCELLENCE (MŠMT) podprogram INTER-COST	3
Program Mobility (MŠMT)	4
Program mezinárodní spolupráce- Visegrádská skupina (MŠMT)	1
Mezinárodní mobilita výzkumných pracov (MŠMT-OPVVV)	2

III. 8. Konference a zahraniční hosté

V roce 2019 ústav organizoval či spoluorganizoval **6 konferencí s mezinárodní účastí**, kterých se účastnilo 452 hostů z toho 145 cizinců a **8 konferencí na národní úrovni, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spolupořadatel** s celkovou účastí 426 účastníků, z toho 47 cizinců.

Konference s mezinárodní účastí

Nanocatalysis Day

11. 4. 2019, Místo: Ústav fyzikální chemie AVČR, v. v. i., počet účastníků: 80 z toho ze zahraničí: 20

39th Modern Electrochemical Methods

20.-24. 5. 2019, Místo: Jetřichovice, počet účastníků: 85 z toho ze zahraničí: 31

The Second International Conference on Soft Chemical Ionization Mass Spectrometry and its Applications to Trace Gas Analysis

10.-13. 6. 2019, Místo: Ústav fyzikální chemie AVČR, v. v. i., 52 z toho ze zahraničí: 41

52nd Heyrovský Discussion

16.-20. 6. 2019, Místo: Zámek Liblice, počet účastníků: 48 z toho ze zahraničí: 16

Dynamic covalent chemistry: Frontiers & Perspectives

27. 6. 2019, Místo: Ústav fyzikální chemie AVČR, v.v.i., počet účastníků: 102 z toho ze zahraničí: 23

51th Symposium on Catalysis

4.-5. 11. 2019, Místo: Ústav fyzikální chemie AVČR, v.v.i., počet účastníků: 85 z toho ze zahraničí: 14

Významné vědecké akce na národní úrovni, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spolupořadatel

Výzkum meziplanetární hmoty a extrasolárních systémů

8. - 10. 11. 2019, Místo: Horský hotel Charbulák, počet účastníků: 25

Prague Membrane Discussions 2019 – Spring Event

21. 3. 2019, Místo: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, počet účastníků: 52

The student seminar of JHI 2019

29. - 30. 4. 2019, Místo: Zámek Liblice, počet účastníků: 58, z toho ze zahraničí: 5

Potlach č. VII

15. 10. 2019, Místo: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, počet účastníků: 69, z toho ze zahraničí: 6

Na hranici Země a vesmíru

23. - 24. 10. 2019, Místo: Hvězdárna a radioklub lázeňského města Karlovy Vary o.p.s. počet účastníků: 13

60. výročí udělení Nobelovy ceny za chemii prof. Jaroslavu Heyrovskému

11. 11. 2019, Místo: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, počet účastníků: 90 z toho ze zahraničí: 20

Heyrovský Memorial Lecture

10. 12. 2019, Místo: Přírodovědecká fakulta UK, počet účastníků: 47 z toho ze zahraničí: 3

Odpoledne s elektrochemií

9. 12. 2019, Místo: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, počet účastníků: 72 z toho ze zahraničí: 13

Zahraniční hosté ústavu

V roce 2019 ústav navštívilo **13 zahraničních hostů**; kteří v rámci svého pobytu přednesli své přednášky.

Mezi významnými hosty byl **prof. Renato Zenobi, ETH Zurich, Switzerland**, který přednesl 29. **Brdičkovu přednášku** na téma "Nanoscale Chemical Analysis and Imaging using Tip-Enhanced Raman Spectroscopy". Další významnou přednášku přednesl profesor **prof. Jean-Marie Lehn, Institut de Science et d'Ingénierie (Supramoléculaire Université de Strasbourg, France)** s přednáškou "Perspectives in Chemistry: Towards Adaptive Chemistry".



prof. Renato Zenobi

*Eidgenössische Technische Hochschule
Zürich
Switzerland*



prof. Jean-Marie Lehn

*Institut de Science et d'Ingénierie
Supramoléculaire
Université de Strasbourg, France*

Mezi dalšími významnými hosty byli profesor **prof. Emilio Pérez Álvarez, IMDEA Nanoscience, Madrid, Spain**, který přednášel na téma „Diversions and junctions in the road of science: from carbon nanotube rotaxanes to covalent organic frameworks“, **prof. Euan Kay, School of Chemistry, University of St. Andrews, United Kingdom**, s přednáškou „Manipulating the Monolayer: Dynamic Covalent Nanoparticle Building Blocks“, nebo **prof. Max von Delius, Institute of Organic Chemistry and Advanced Materials, University of Ulm, Germany**, který představil téma „New Tools and Uses of Dynamic Covalent Chemistry“.

IV. Hodnocení další a jiné činnosti: Ekonomické oddělení

Vedle své hlavní činnosti ústav v roce 2019 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
M-CATERING	25099671
Three Bond Czech, s. r. o.	27194639
Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i.	68378271

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 2019 proběhla kontrola GAČR na čerpání finančních prostředků ze všech grantů GAČR za r. 2018 a částečně i za r. 2017. Kontrola zjistila neoprávněné nakládání přidělených finančních prostředků, rozporu s podmínkami smlouvy, a z toho důvodu byla ze strany GAČR krácena dotace o 167.330,27 Kč. Vzhledem k tomu, že tyto náklady na granty GAČR byly vynaloženy jako oprávněné, avšak neuznatelné, byla tato částka proúčtována na účet 542/100, kde se evidují daňově neuznatelné náklady, protože tyto se týkaly minulých účetních období, tj. r. 2017 a 2018. Na základě výsledků kontroly došlo k důslednějšímu sledování a kontrole uznatelných nákladů podle jednotlivých grantových smluv.

V účetním roce 2019 byly odepsány starší pohledávky ve výši 40.072,73 Kč, které jsou prakticky nedobytné. Jednalo se především o odpis pohledávek za zaměstnance ze zahraničí. Tyto pohledávky byly za ubytování a za obědy, kdy vyúčtování těchto krátkodobých zahraničních pracovníků obdržela účetní jednotka až po jejich odchodu z ÚFCH JH nebo z ČR. Tyto pohledávky jsou z minulých let, kdy jsme se je snažili neúspěšně vymáhat. Do skupiny odepsaných pohledávek patří i odpis pohledávky, kdy byla 2x stržena úhrada kartou a reklamace nebyla uznána.

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

V roce 2019 nenastaly žádné skutečnosti, které by nějakým zvláštním způsobem ovlivnily hospodářské postavení instituce. Výsledky hospodaření umožnily splnit plánovou tvorbu rezervy na opravu nemovitosti v Michli.

VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště

Ústav bude v období 2020-2022 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 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 tak získal k dispozici necelých 2,5 milionu Eur (přes 60 milionů korun), které využil mimo jiné pro získání světově uznávané vědecké osobnosti na základě mezinárodního výběrového řízení. Pozici obsadil prof. Štefan Vajda z Argonne National Laboratory and Institute for Molecular Engineering of the University of Chicago. V roce 2020 zahájí tým Oddělení nanokatalýzy experimentální výzkum v plném rozsahu.

Součástí strategie je i rozšíření účasti ÚFCH JH v projektech EU a podpora mladých vědeckých pracovníků v rozvoji jejich vědecké kariéry. Ústav získal prestižní ocenění HR Award, plným názvem „HR Excellence in Research Award“, udělené Evropskou komisí za excelenci v péči o lidské zdroje ve vědeckém prostředí. Získání HR Awardu je nejen známkou kvality, ale i trvalým závazkem pro pokračující rozvoj a vytváření příznivých podmínek pro pracovníky. Proto byl vytvořen akční plán popisující závazným způsobem konkrétní kroky pro dosažení souladu postupů s „Evropskou chartou pro výzkumné pracovníky“ a „Kodexem chování pro přijímání nových pracovníků“. Po dvou letech bude provedeno střednědobé hodnocení, a posléze bude ústav hodnocen každé tři roky.

V roce 2020 bude zkvalitněna administrativní podpora vědecké práce formou procesního řízení, a to zejména v oblastech grantové podpory (vznik nové grantové skupiny jako základ budoucího grantového oddělení), nábory pracovníků (OTM-R), ochrany duševního vlastnictví, open access přístupu k informacím, transferu technologií a jejich licencování.

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.

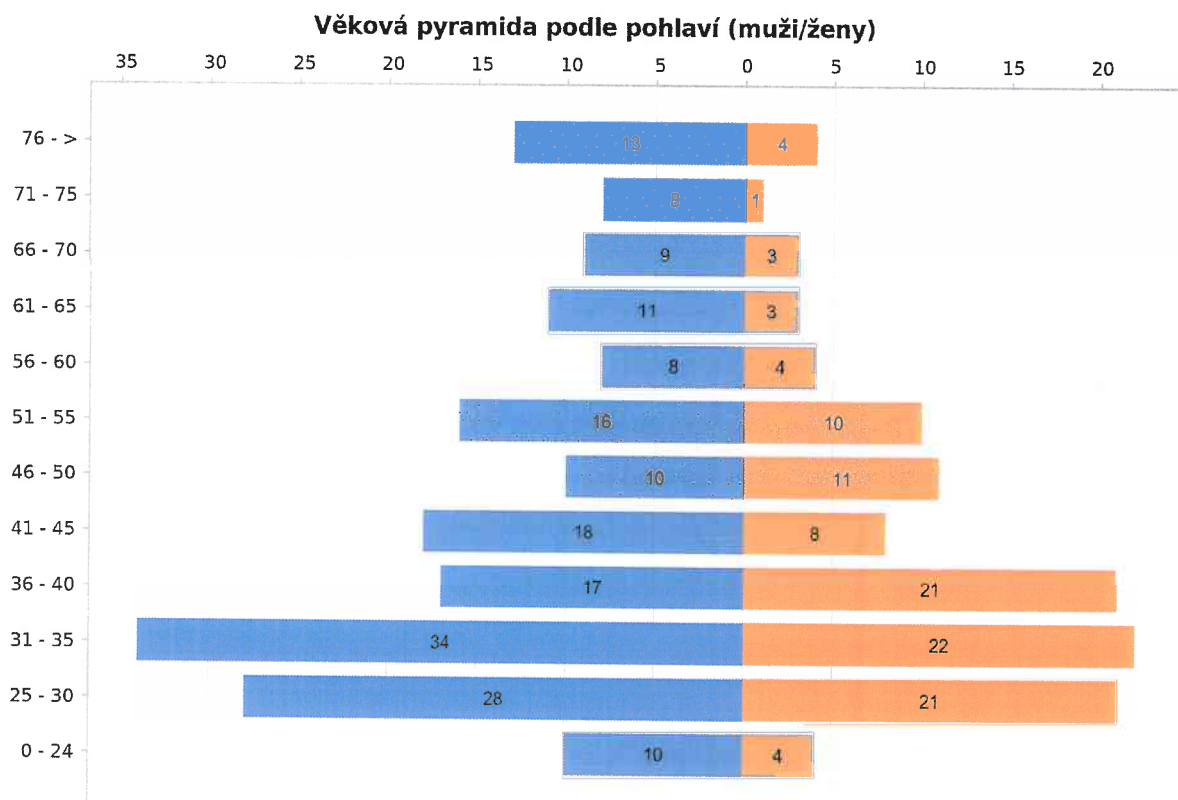
Ústav zajišťuje pravidelnou likvidaci odpadů vzniklých v souvislosti s výzkumnou činností, zejména chemikálií a odepsané kancelářské techniky s využitím služeb specializovaných firem, a to v součinnosti s úřadem městské části. Rovněž třídí vyprodukovaný odpad, konkrétně sklo, papír, plasty, baterie a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

IX. Aktivity v oblasti pracovních-právních vztahů-oddělení ekonomické dodat

Přehled počtu zaměstnanců a rozdělení osobních nákladů jsou uvedeny v Příloze k účetní závěrce. Fyzický stav zaměstnanců k 31. 12. 2019 byl 294, průměrný přepočtený stav za rok 2019 byl 240. 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.

PŘEHLED POČTU ZAMĚSTNANCŮ K 31.12. 2019

POČET ZAMĚSTNANCŮ CELKEM	294
PRŮMĚRNÝ PŘEPOČTENÝ STAV (NA ÚVAZKY)	240
POČET ZAMĚSTNANCŮ (POUZE VĚDECKÉ POZICE)	234
DOKTORANDI	47
POČET ZAHRANIČNÍCH VĚDCŮ (POUZE VĚDECKÉ POZICE)	88 (38 %)
POČET ŽEN (POUZE VĚDECKÉ POZICE)	82



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

V roce 2019 neobdržel ÚFCH JH žádnou žádost o poskytnutí informací dle zákona č. 106/1999 Sb.

Razítko

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

podpis ředitele instituce

ZPRÁVA NEZÁVISLÉHO AUDITORA

o ověření účetní závěrky za období
od 1. ledna 2019 do 31. prosince 2019

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

IČO:

182 23 Praha 8

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. 2019, 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. 2019 a nákladů a výnosů a výsledku jejího hospodaření za rok končící 31. 12. 2019 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 Instituci 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 způsobilé 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 vzniknout 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 17. června 2020



Přílohy: Rozvaha v plném rozsahu ke dni 31.12.2019

Výkaz zisku a ztrát v plném rozsahu za ke dni 31.12.2019

Příloha v účetní závěrce k 31.12.2019

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

Rozvaha (balance) 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 31.12.2019

(v celých tisících Kč)

IČ
61388955

AKTIVA

		Číslo řádku	Stav k prvnímu dni účet. období	Stav k poslednímu dni účet. období
A.	Dlouhodobý majetek celkem	Součet ř. 2+10+21+29	271 190	287 854
I.	Dlouhodobý nehmotný majetek celkem	Součet ř. 3 až 9	827	2 002
	1. Nehmotné výsledky výzkumu a vývoje	3		
	2. Software	4	827	2 002
	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		
II.	Dlouhodobý hmotný majetek celkem	Součet ř. 11 až 20	740 535	784 096
	1. Pozemky	11	19 662	19 662
	2. Umělecká díla a předměty	12		
	3. Stavby	13	169 573	169 645
	4. Samostatné movité věci a soubory movitých věcí	14	550 936	589 595
	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	17	4 847
	10. Poskytnuté zálohy na dlouhodobý hmotný majetek	20		
III.	Dlouhodobý finanční majetek celkem	Součet ř. 22 až 28		
	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		
IV.	Oprávky k dlouhodobému majetku celkem	Součet ř. 30 až 40	-470 172	-498 244
	1. Oprávky k nehmotným výsledkům výzkumu a vývoje	30		
	2. Oprávky k softwaru	31	-679	-778
	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	-39 469	-42 948
	7. Oprávky k samostatným movitým věcem a souborům movitých věcí	36	-429 677	-454 171
	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.	Krátkodobý majetek celkem	Součet ř. 42+52+72+81	157 834	162 167
I.	Zásoby celkem	Součet ř. 43 až 51	1 042	996
	1. Materiál na skladě	43	1 021	996
	2. Materiál na cestě	44	21	
	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		
II.	Pohledávky celkem	Součet ř. 53 až 71	1 741	2 668
	1. Odeběratelé	53	396	593
	2. Směnky k inkasu	54		
	3. Pohledávky za eskontované cenné papíry	55		
	4. Poskytnuté provozní zálohy	56	292	1 161
	5. Ostatní pohledávky	57		
	6. Pohledávky za zaměstnanci	58	272	138
	7. Pohledávky za institucemi sociálního zabezpečení a veřejného zdravotního pojištění	59		
	8. Daň z příjmů	60	740	740
	9. Ostatní přímé daně	61		
	10. Daň z přidané hodnoty	62	24	34
	11. Ostatní daně a poplatky	63	13	2
	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	4	
	18. Dohadné účty aktivní	70		
	19. Opravná položka k pohledávkám	71		
III.	Krátkodobý finanční majetek celkem	Součet ř. 73 až 80	153 134	156 595
	1. Pokladna	73	493	528
	2. Ceniny	74		57
	3. Bankovní účty	75	152 641	156 010
	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		
IV.	Jiná aktiva celkem	Součet ř. 82 až 84	1 917	1 908
	1. Náklady příštích období	82	1 798	1 486
	2. Příjmy příštích období	83	119	422
	3. Kursové rozdíly aktivní	84		
	AKTIVA CELKEM	Součet ř. 1+42	429 024	450 021



PASIVA

		Číslo řádku	Stav k prvnímu dni účet. období	Stav k poslednímu dni účet. období	
A.	Vlastní zdroje celkem	Součet ř. 87+91	86	354 509	364 092
I.	Jmění celkem	Součet ř. 88 až 90	87	354 027	363 873
	1. Vlastní jmění		88	274 335	291 000
	2. Fondy		89	79 692	72 873
	3. Oceňovací rozdíly z přecenění majetku a závazků		90		
II.	Výsledek hospodaření celkem	Součet ř. 92 až 94	91	482	219
	1. Účet výsledku hospodaření		92		219
	2. Výsledek hospodaření ve schvalovacím řízení		93		
	3. Nerozdělený zisk, neuhrazená ztráta minulých let		94	482	
B.	Cizí zdroje celkem	Součet ř. 95+98+106+130	95	74 515	85 929
I.	Rezervy celkem	ř. 97	96	39 100	41 600
	1. Rezervy		97	39 100	41 600
II.	Dlouhodobé závazky celkem	Součet ř. 99 až 105	98		
	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		
III.	Krátkodobé závazky celkem	Součet ř. 107 až 129	106	35 317	44 306
	1. Dodavatelé		107	1 953	2 291
	2. Směnky k úhradě		108		
	3. Přijaté zálohy		109	14 500	13 803
	4. Ostatní závazky		110	201	64
	5. Zaměstnanci		111	8 285	9 668
	6. Ostatní závazky vůči zaměstnancům		112	375	348
	7. Závazky k institucím sociál. zabezp. a veřejného zdravot. pojištění		113	4 843	5 561
	8. Daň z příjmů		114		
	9. Ostatní přímé daně		115	1 671	1 966
	10. Daň z přidané hodnoty		116	1 095	6 321
	11. Ostatní daně a poplatky		117		
	12. Závazky ze vztahu k státnímu rozpočtu		118	1 861	3 618
	13. Závazky ze vztahu k rozpočtu orgánů územních samosprávních celků		119		
	14. Závazky z upsaných nesplacených cenných papírů a vkladů		120		
	15. Závazky k účastníkům sdružení		121		
	16. Závazky z pevných termínových operací		122		
	17. Jiné závazky		123	167	164
	18. Krátkodobé bankovní úvěry		124		
	19. Eskontní úvěry		125		
	20. Vydané krátkodobé dluhopisy		126		
	21. Vlastní dluhopisy		127		
	22. Dohadné účty pasivní		128	366	502
	23. Ostatní krátkodobé finanční výpomoci		129		
IV.	Jiná pasiva celkem	Součet ř. 131 až 133	130	98	23
	1. Výdaje příštích období		131	4	3
	2. Výnosy příštích období		132	94	20
	3. Kursové rozdíly pasivní		133		
	PASIVA CELKEM	Součet ř. 86+95	134	429 024	450 021



Sestaveno dne: 5.6.2020

Podpisový záznam:



[Handwritten signature in blue ink]

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

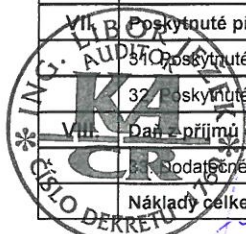
Česká republika

Věda a výzkum

ke dni 31.12.2019
(v celých tisících Kč)

IČ
61388955

	Číslo řádku	Činnosti	
		hlavní	hospodářská
A. Náklady	1	344 613	
I. Spotřebované nákupy celkem	2	36 553	
1. Spotřeba materiálu	3	29 602	
2. Spotřeba energie	4	3 719	
3. Spotřeba ostatních neskladovatelných dodávek	5	3 232	
4. Prodané zboží	6		
II. Služby celkem	7	43 622	
5. Opravy a udržování	8	7 413	
6. Cestovné	9	11 267	
7. Náklady na reprezentaci	10	313	
8. Ostatní služby	11	24 629	
III. Osobní náklady celkem	12	182 709	
9. Mzdové náklady	13	131 981	
10. Zákonné sociální pojištění	14	43 593	
11. Ostatní sociální pojištění	15		
12. Zákonné sociální náklady	16	4 663	
13. Ostatní sociální náklady	17	2 472	
IV. Daně a poplatky celkem	18	388	
14. Daň silniční	19	14	
15. Daň z nemovitostí	20	2	
16. Ostatní daně a poplatky	21	372	
V. Ostatní náklady celkem	22	42 066	
17. Smluvní pokuty a úroky z prodlení	23		
18. Ostatní pokuty a penále	24		
19. Odpis nedobytné pohledávky	25	40	
20. Úroky	26		
21. Kursové ztráty	27	1 113	
22. Dary	28		
23. Manka a škody	29	1	
24. Jiné ostatní náklady	30	40 912	
VI. Odpisy, prodaný majetek, tvorba rezerv a opravných položek celkem	31	39 275	
25. Odpisy dlouhodobého nehmotného a hmotného majetku	32	36 775	
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	2 500	
30. Tvorba opravných položek	37		
31. Poskytnuté příspěvky celkem	38		
32. Poskytnuté příspěvky zúčtované mezi organizačními složkami	39		
33. Poskytnuté členské příspěvky	40		
VII. Daň z příjmů celkem	41		
34. Dodatečné odvozy daně z příjmů	42		
Náklady celkem	43	344 613	

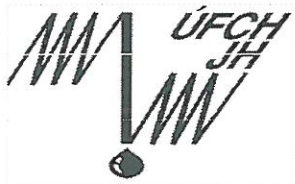


	Číslo řádku	Činnosti	
		hlavní	hospodářská
B. Výnosy	44	344 832	
I. Tržby za vlastní výkony a za zboží celkem	45	8 490	
1. Tržby za vlastní výroby	46		
2. Tržby z prodeje služeb	47	8 490	
3. Tržby za prodané zboží	48		
II. Změny stavu vnitroorganizačních zásob celkem	49		
4. Změna stavu zásob nedokončené výroby	50		
5. Změna stavu zásob polotovarů	51		
6. Změna stavu zásob výrobků	52		
7. Změna stavu zvířat	53		
III. Aktivace celkem	54		
8. Aktivace materiálu a zboží	55		
9. Aktivace vnitroorganizačních služeb	56		
10. Aktivace dlouhodobého nehmotného majetku	57		
11. Aktivace dlouhodobého hmotného majetku	58		
IV. Ostatní výnosy celkem	59	88 974	
12. Smluvní pokuty a úroky z prodlení	60		
13. Ostatní pokuty a penále	61		
14. Platby za odepsané pohledávky	62		
15. Úroky	63	22	
16. Kursové zisky	64	8	
17. Zúčtování fondů	65	26 351	
18. Jiné ostatní výnosy	66	62 593	
V. Tržby z prodeje majetku, zúčtování rezerv a opravných položek celkem	67	33	
19. Tržby z prodeje dlouhodobého nehmotného a hmotného majetku	68	33	
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		
VI. Přijaté příspěvky celkem	75		
26. Přijaté příspěvky zúčtované mezi organizačními složkami	76		
27. Přijaté příspěvky (dary)	77		
28. Přijaté členské příspěvky	78		
VII. Provozní dotace celkem	79	247 335	
29. Provozní dotace	80	247 335	
Výnosy celkem	81	344 832	
C. Výsledek hospodaření před zdaněním	82	219	
34. Daň z příjmů	83		
D. Výsledek hospodaření po zdanění	84	219	

Sestaveno dne: 5.6.2020

Podpisový záznam: 





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. 2019
za účetní období roku 2019, tj. 1.1. až 31.12.2019

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. 2019
Okamžik sestavení účetní závěrky: 05. 06. 2020

V roce 2019 podle zákona (č. 341/2005 Sb. o v.v.i.) pokračovalo funkční období všem orgánům ÚFCH JH, zvolených r. 2017, včetně statutárního orgánu beze změn. Nejvyšším orgánem ze zákona je „**Dozorčí rada**“, jediným **statutárním zástupcem je ředitel**, který jako jediný ze zákona zastupuje ÚFCH JH se všemi právy a povinnostmi. Dalším voleným orgánem je „**Rada instituce**“, jejíž práva a povinnosti jsou rovněž určeny 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 zajišťoval stravování pracovníků areálu, tj. ostatních ústavů AV ČR. Tuto činnost má ÚFCH JH zakotvenu ve zřizovací listině. Stravování je zajištěno specializovanou firmou *M-CATERING*, která má prostory v budově ÚFCH JH v ulici *Na Slovance* pronajaty na komerční bázi

Část příjmů je zajištěna i výnosem z úroků na běžném účtu. Tyto úroky jsou však jak v minulých letech, tak i v letošním roce bezvýznamné.

Podle výše uvedeného účetní jednotka vykonává převážně 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 výlučně jako příspěvek na hlavní činnost, popřípadě ke krytí režijních nákladů, 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. Příjmy z komerční činnosti jsou však pod hladinou významnosti a ÚFCH JH není na nich ekonomicky závislý.

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 ovládán jinou osobou s výjimkou svého zřizovatele, jehož práva a povinnosti jsou jednoznačně stanoveny v příslušných ustanoveních v zákoně 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 2019 navazuje na účetní rozvrh roku 2018 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.

Vnitropodnikové (interní) účtování 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. Na „grantovém“ okruhu jsou účtovány všechny operace související s přidělenými granty, tj. to, co je financováno jinými subjekty než je AV ČR (např. GAČR, TAČR, ministerstva, EU apod.) nebo vlastními zdroji.

Některé dotace na TA120 mají v podmínkách spolufinancování z vlastních zdrojů. Spolufinancování probíhá buďto z institucionálních prostředků (TA100) nebo pokud toto není možné, buďto z obecně závazných předpisů nebo podmínek grantu, tak i z vlastních prostředků na vědu a výzkum (TA220). Rovněž tak dofinancování, pokud si to dotační orgán výslovně přeje, může být na vrub rezervního fondu, jehož zůstatek je na konci sledovaného období 26.496.703,03 Kč

Vzhledem k tomu, že i v tomto účetním období výdaje v institucionálním okruhu byly vyšší než dotace od AV ČR, skončilo hospodaření v této oblasti 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.

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“. Účtování o laboratorních plynech je prováděno rovněž způsobem „B“, protože zůstatek plynu v tlakové láhvi nelze objektivně zjistit a z hlediska celkového obrátu se jedná o marginální položku. 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 průměrnými cenami
- zásoby vlastní výroby v r. 2019 nebyly
- zásoby v nevýznamné míře, např. zůstatek PHM v nádržích vozidel, sledovány nejsou
- 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 2018 nezměnily. (pozn. účetní odpisy nejsou daňově účinné):

Název a interní označení (dle číselníku majetku)	Odpisová sazba % r. 2019	Odpisová sazba % r. 2018
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
Přístrojová účetní technika, sk. PC	33,30	33,30
Dopravní prostředky, sk. H6	20,00	20,00
Intenzita, sk. H7 -	10,00	10,00
Nehmotný investiční majetek, sk. PG	20,00	20,00



Účetní odpisy ve výši 35.986.214,11,- Kč na investice pořízené z dotace, jsou nákladovou položkou, avšak daňově neúčinnou. Další odpisy ve výši 788.887,- z dlouhodobého majetku, pořízené z vlastních zdrojů, jsou též odepisovány jen účetně. Na druhé straně k těmto odpisům je zaúčtováno finanční krytí, které je také daňově neúčinným výnosem (viz § 18a zákona č. 586/1992 Sb.).

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. 2019:

1 EUR	25.410 CZK
1 USD	22,621 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	25.725 CZK
1 USD	21,466 CZK

Pohledávky

Problematika nedobytných pohledávek je pod hladinou významnosti. Odepsány jsou pouze ty pohledávky, u kterých by náklady na vymáhání a zejména pracnost převýšily vymoženou částku.

V účetním roce 2019 byly odepsány starší pohledávky ve výši 40.072,73 Kč, které jsou prakticky nedobytné. Jednalo se především o odpis pohledávek za zaměstnanci ze zahraničí. Tyto pohledávky byly za ubytování a za obědy, kdy vyúčtování těchto krátkodobých pracovníků ze zahraničí obdržela účetní jednotka až jak po jejich odchodu z ÚFCH JH, tak i z ČR. Tyto pohledávky jsou z minulých let, kdy jsme se je snažili neúspěšně vymáhat. Do skupiny odepsaných pohledávek patří i odpis pohledávky, kdy byla 2x stržena úhrada kartou a reklamace nebyla uznána.

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. 280/2009 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, tj. interním kontrolním orgánem, 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.

V roce 2019 proběhla kontrola GAČR na čerpání finančních prostředků ze všech grantů GAČR za r. 2018 a částečně i za r. 2017. Kontrola zjistila neoprávněné nakládání přidělených finančních prostředků, v rozporu s podmínkami smlouvy, a z toho důvodu byla ze strany GAČR krácena dotace o 167.330,27 Kč. Vzhledem k tomu, že tyto náklady na granty GAČR byly vynaloženy jako oprávněné, avšak neuznatelné, byla tato částka průúčtována na účet 542/100, kde se evidují daňově neuznatelné náklady, protože tyto se týkaly minulých účetních období, tj. r. 2017 a 2018.

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



Zaměstnanci

Přehled počtu zaměstnanců ÚFCH JH k 31. 12. 2019:

1. ve fyz. osobách	294
2. přepočtený stav	240

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.

ÚFCH JH má historicky celkem 5.573 obchodních partnerů. Aktivních z nich je 5.456. Z těchto aktivních partnerů je celkem 1.530 obchodních firem (251 akciových společností, 1.279 spol. s ručením omezeným) Zbytek, resp. větší část partnerů, ale z obchodního hlediska méně významnou, tvoří obchodní společnosti jiné formy, které definuje občanský zákoník, podnikající fyzické osoby a nepodnikatelské subjekty. Velké zakázky (tj. podle zákona č. 134/2016 Sb.), kterých bylo v r. 2019 celkem 15, z toho tzv. VZMR (limit 500 tis Kč a výše) 9, formálně řeší smluvní AK Togel, která je specializována na tento typ zakázek. Obchodní případy pod 500 tis. Kč, pokud např. grantové podmínky nestanoví jinak, jsou v gesci jednotlivých pracovníků, avšak podléhají schválení (nikoliv výběru) statutárního orgánu tj. řediteli. Lze tedy konstatovat, že jak členové dozorčí rady, tak i statutární orgán, výběry obchodních partnerů žádným způsobem neovlivňovali, pouze činili úkony jim stanovené již dříve uváděným zákonem č. 341/2005 Sb. (zejména §§ 17 a 19).

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 2.600 tis. Kč, což je oproti r. 2018 mírný nárůst, ten však souvisí s nárůstem mezd. Tento příděl je povinný podle § 27 odst. 1 zák. č.341/2005 Sb. o v.v.i.jak je již na začátku tohoto odstavce uvedeno

V roce 2019 účetní jednotka rozpustila na začátku roku FÚUP z minulých let a na konci roku byl vytvořen FÚUP v celkové výši 1.800 tis. Kč

V roce 2020 mezi rozvahovým dnem a okamžikem sestavení účetní závěrky nastaly dvě události, které měly formální vliv na účetní závěrku. Jednak to byla mimořádná opatření vlády a následně doporučení AV ČR (jako zřizovatele) ke karanténním opatřením, kdy byla z těchto důvodů omezena přítomnost pracovníků na pracovišti a převedena na práci mimo ÚFCH. Tento přechod však omezoval vzájemnou komunikaci pracovníků, což spolu s výpadkem pracovnice účtárny mělo za následek prodloužení doby zpracování účetní závěrky. Další vliv na zpoždění závěrkových prací měl přechod na nový systém HELIOS iNUVIO, který proběhl zcela novým upgradem původního systému a plně nahradil od 1.5. 2020 stávající HELIOS Orange

Rezervy

Rezerva se tvoří na opravu nemovitosti v Michli, kde je plánovaná cena opravy cca 50 mil Kč. Předpokladem je, že pokud bude na opravu dotace od AV ČR, tak se ÚFCH JH bude muset podílet 50 – 80% na opravě vlastními prostředky.

Plánovaná tvorba rezervy je 50 mil Kč. Výše rezervy, která je vzhledem k horšímu hospodářskému výsledku tvořená v roce 2019, činí 2.5 mil. Kč. Celková výše rezerv na opravu hmotného majetku, nemovitosti v Michli, je k 31.12. 2019 celkem 41.600 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 § 20 odst.7 zákona č. 586/1992 Sb. o DZP. Toto financování, úsporou za daňové povinnosti, je přednostně využíváno v následujícím roce na hrazení běžných výdajů ÚFCH JH. Vzhledem k aktuálnímu 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.





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 aktuálnímu 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.

Účetní jednotka plní úkoly dané vyhláškou č. 312/2014 Sb. o podmínkách sestavení účetních výkazů za Českou republiku (konsolidační vyhláška státu), tj. předává údaje v předepsaném formátu na MF ČR a dále podle zákona č. 25/2017 Sb. o sběru vybraných údajů pro účely monitorování a řízení veřejných financí (peněžní toky).

V následujícím roce nedošlo k žádným závažným událostem, které by měly mít vliv na fungování účetní jednotky. Vzhledem k tomu, že hlavním zdrojem příjmů jsou různé typy dotací, které ke dni sestavení tohoto výkazu nebyly kráceny a ani jejich krácení se nepředpokládá, není předpoklad, že k finančním problémům, např. neschopnosti plnit své závazky nebo ukončení činnosti účetní jednotky může nastat. Krizová situace, spojená s koronavirem, nemá vliv na ekonomické fungování účetní jednotky.

Datum sestavení: 05.06. 2020 ;	Sestavil: Ing. Ivo Friedjung  Podpis a jméno	Statutární zástupce: prof. Prof. Dr. Martin Hof, Dr. Rer. nat. DSc  Podpis a jméno
-----------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------



