

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

IČ: 61388980

Sídlo: Řež

## **Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2020**

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 1. 6. 2021

Radou pracoviště schválena dne: 9. 6. 2021

V Řeži dne 9. 3. 2021

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

### a) Výchozí složení orgánů pracoviště

Ředitel pracoviště: **Ing. Kamil Lang, CSc., DSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.**  
jmenován s účinností od: 1. 8. 2018

Rada pracoviště zvolena dne 7. 12. 2016 ve složení:

předseda: **Dr. Michael Londesborough, PhD., ÚACH AV ČR, v. v. i.**

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

členové:

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

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

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

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

Ing. Petra Ecorchard, PhD., ÚACH AV ČR, v. v. i.

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

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

prof. David Sedmidubský, CSc., VŠCHT Praha

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

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

Dozorčí rada jmenována dne 1. 5. 2017 ve složení:

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

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

členové:

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

prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, VŠCHT Praha

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

## **b) Změny ve složení orgánů:**

V roce 2020 nebyly realizovány žádné změny ve složení orgánů ústavu.

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

### **Ředitel:**

V r. 2020 byly zajišťovány především následující agendy:

- plnění výzkumných úkolů a postupů řešení grantových projektů včetně prezenčních kontrol aktivit a personálního zabezpečení v jednotlivých odděleních a laboratořích,
- kontrola naplňování koncepce výzkumné činnosti Ústavu pro roky 2017-2022
- řádné vedení účetnictví,
- vypracování návrhů žádostí o podporu nákladných přístrojů v r. 2021,
- výběrová přijímací řízení vysokoškolsky vzdělaných pracovníků,
- periodická činnost a kontrola na úseku bezpečnosti práce, prevence rizik a ochrany zdraví při práci,
- účast na zasedáních Rady ústavu a zasedání Dozorčí rady.

V průběhu r. 2020 byly vydány čtyři interní předpisy (IP): IP č. 104 – Mzdový předpis, IP č. 105 – Využití prostředků Sociálního fondu, IP 106 – Pro zadávání veřejných zakázek a IP č. 107 – Volební řád Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i. Byl vydán jeden příkaz ředitele k provedení inventarizace hospodářských prostředků v r. 2020 a dvě směrnice s názvy Pro účely poskytování cestovních náhrad v roce 2020 a Metodika vykazování skutečných nepřímých nákladů projektů výzkumu a vývoje v r. 2020.

V závěru roku byla vyhodnocena a individuálně oceněna publikační aktivita pracovníků. Byla rovněž provedena analýza věkové struktury pracovníků ústavu, posouzeno personální zabezpečení řešení jednotlivých výzkumných úkolů a přijata příslušná opatření pro r. 2021.

Přístrojové vybavení ústavu bylo v r. 2020 doplněno o monokrystalový X-ray difraktometr (Rigaku Innovative Technologies Europe), volumetrický sorpční analyzátor adsorpce plynů s příslušenstvím (3P Instruments) a gama spektrometr s polovodičovým detektorem se studnovou geometrií pro měření vzorků a účinným stíněním s velmi nízkým pozadím včetně příslušenství (Camberra Packard).

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

V r. 2020 bylo řešeno 31 projektů VaV v programech GA ČR (14), MPO (3), TA ČR (6), MŠMT (6), MK (1) a Horizont 2020 (1). Účelové prostředky plynoucí z podpory zmíněných poskytovatelů do rozpočtu představovaly cca 39 % neinvestičních nákladů ústavu. Mzdové prostředky vyplacené z účelových dotací činily cca 29 %.

## **Rada pracoviště:**

V r. 2020 se uskutečnilo 10 jednání Rady ÚACH AV ČR v. v. i.:

98. jednání, 21. 1. 2020
- Rada projednala a schválila IP č. 104 – Mzdový předpis a IP č. 105 – Využití prostředků Sociálního fondu.
99. jednání, 11. – 15. 3. 2020, *per rollam*
- Rada projednala a schválila podání návrhu na udělení Prémie Otto Wichterle Jiřímu Henychovi.
100. jednání, 21. – 24. 3. 2020, *per rollam*
- Rada projednala přihlášky návrhů do veřejných grantových soutěží pro rok 2021 a doporučila je k podání.
101. jednání, 28. – 29. 4. 2020, *per rollam*
- Rada projednala a schválila podání návrhu K. G. Sugi na zařazení do Programu perspektivních lidských zdrojů.
102. jednání, 11. 6. 2020
- Rada projednala a schválila Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ústavu za r. 2019, seznámila se se zprávou auditora o ověření účetní závěrky za r. 2019, projednala a schválila rozpočet výnosů a nákladů na r. 2020 a střednědobý výhled 2021-2022. Rada dále schválila přesun hospodářského výsledku za r. 2019 do Fondu reprodukce majetku a do Rezervního fondu.
103. jednání, 19. – 22. 6. 2020, *per rollam*
- Rada projednala návrh projektu a doporučila jej k podání do grantové soutěže Technologické agentury ČR.
104. jednání, 3. – 8. 7. 2020, *per rollam*
- Rada projednala návrh projektu a doporučila jej k podání do grantové soutěže DELTA 2 TA ČR.
105. jednání, 17. – 22. 9. 2020, *per rollam*
- Rada projednala a schválila podání návrhů na zařazení Moniky Motlochové a Jana Nekvindy do Programu podpory perspektivních lidských zdrojů Akademie věd.
106. jednání, 3. – 9. 11. 2020, *per rollam*
- Rada projednala a schválila novelu interního předpisu č. 100 – Volebního řádu pro volby v Ústavu anorganické chemie AV ČR.
107. jednání – 1. – 4. 12. 2020, *per rollam*
- Rada projednala dva návrhy do programu velkých infrastruktur (MŠMT, 2023–29) a doporučila je k podání.

### **Dozorčí rada:**

V r. 2020 se uskutečnila 4 jednání Dozorčí rady ÚACH AV ČR v. v. i.

*Per rollam 1/2020; usnesení bylo schváleno 29. 1. 2020*

- Dozorčí rada projednala znění Smlouvy o dodávce a implementaci ekonomického informačního systému a Smlouvy o poskytování provozní podpory, údržby a rozvoje ekonomického informačního systému mezi Ústavem anorganické chemie AV ČR (objednatel č. 5) a MAGION system, a. s., jako poskytovatelem a vydala předchozí písemný souhlas k jejich uzavření.

*Per rollam 2/2020; usnesení bylo schváleno 28. 5. 2020*

- Dozorčí rada projednala znění Smlouvy na dodávku monokrystalového X-ray difraktometru mezi objednatelem Ústavem anorganické chemie AV ČR, a dodavatelem Rigaku Innovative Technologies Europe, s.r.o vydala předchozí písemný souhlas k jejímu uzavření.

19. jednání (distanční), 3.6. 2020

Dozorčí rada

- vyslovila souhlas s Výroční zprávou o činnosti a hospodaření ÚACH AV ČR, v. v. i. v r. 2019,
- vzala na vědomí zprávu nezávislého auditora o ověření účetní závěrky za r. 2019,
- vyslovila souhlas s návrhem rozpočtu nákladů a výnosů na rok 2020 a vzala na vědomí výhled rozpočtu do r. 2022,
- určila firmu Efekt DC, s.r.o. (IČO 62243292) auditorem na rok 2020,
- předložila zprávu o činnosti DR v r. 2019
- zhodnotila manažerské schopnosti ředitele ÚACH Ing. Kamila Langa, CSc., DSc.

*Per rollam 3/2020; usnesení bylo schváleno 31. 8. 2020*

- Dozorčí rada projednala znění Dodatku č. 2, kterým se měnila smlouva o nájmu parkovacích a manipulačních ploch uzavřená dne 23. 3. 2009 mezi ÚJV Řež, a. s., jako pronajímatelem a Ústavem anorganické chemie AV ČR, v. v. i. jako nájemcem a vydala předchozí písemný souhlas k jeho uzavření. Předmětem změny smlouvy, resp. uzavření dodatku bylo snížení rozlohy pronajatých ploch z 239 m<sup>2</sup> na 91 m<sup>2</sup>.

*Per rollam 4/2020; usnesení bylo schváleno 31. 8. 2020*

- Dozorčí rada dodatečně projednala znění Dodatku č. 1, kterým se měnila smlouva o nájmu prostoru sloužícího k podnikání uzavřená dne 31. 3. 2016 mezi Ústavem anorganické chemie AV ČR, v. v. i., jako pronajímatelem a Českou telekomunikační infrastrukturou, a. s, jako nájemcem a vydala (předchozí) písemný souhlas k jeho uzavření. Předmětem změny smlouvy byla technická úprava zjednodušující formu každoročního zohledňování inflace při úhradě nájemného.

## II. Informace o změnách zřizovací listiny:

V r. 2020 nedošlo ke změně zřizovací listiny.

## III. Hodnocení hlavní činnosti:

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

#### 1a) Stručná charakteristika vědecké činnosti

V roce 2020 byla výzkumná činnost ústavu zaměřena na následující oblasti:

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

#### Fotoaktivní anorganické molekuly a materiály

Výzkum se zaměřuje na syntézu a charakterizaci nových molekul, nanostrukturních materiálů a (nano)materiálů s luminiscenčními (např. fluorescence, fosforescence, teplotně závislé luminiscenční vlastnosti) a fotosensitizačními vlastnosti. Hlavní důraz je kladen na jejich stabilitu, fotostabilitu, nízkou toxicitu, fototoxicitu, biokompatibilitu s ohledem na jejich využití jako stabilních luminiscenčních materiálů nebo v biologii.

Zejména studujeme následujícími systémy

- Molekulové klastry přechodných kovů např. Mo, W, Re a Cu s cílem vyvinout nové biomateriály s fotodynamickými radiosensitizačními a baktericidními vlastnostmi pro fotodynamickou terapii a zvýšení kontrastu při využití rentgenového záření.
- Materiály převážně na bázi porfyrinových molekul s organizovanou strukturou jako kovalentní organické sítě a anorganické polymery. Základním záměrem je získat stabilní struktury s luminiscenčními (např. pro detekci kyslíku), fotodynamickými (např. pro antibakteriální vrstvy, fotodynamickou terapii) a virucidními vlastnostmi.
- Luminiscentní boranové molekuly, které mají účinnou a stabilní laserovou emisi jako alternativa v současných laserových zařízeních. Proto je pozornost zaměřena na přípravu nových klastrů a popis jejich fotofyzikálních vlastností v součinnosti s využitím predikčního potenciálu kvantově chemických výpočetních metod, a dále tenkých filmů luminiscentních boranů v polymerních maticích pro luminiscenční solární koncentrátoři.

## Chemie boranových sloučenin

Výzkum boranů je zaměřen na studium boranových klastrů s využitím v biomedicíně, optice, při ochraně povrchů. Předmětem studia byla zejména

- Systematická syntetická chemie karboranů a metallaboranů orientovaná na design nových biologicky aktivních sloučenin a materiálů.
- Biologicky aktivní borany jako selektivní inhibitory pro protinádorovou terapii. Pokračovala optimalizace struktur inhibitorů enzymu CA-IX a syntéza nových typů klastrových inhibitorů kináz. Na panelu nově připravených sloučenin probíhalo studium faktorů, které jsou zodpovědné za přestup přes gastrointestinální a hematoencefalickou bariéru a studium cytotoxicity na panelu nízkomolekulárních látek s bis(dichlorethyl)aminovou skupinou a fluorescenčně značených látek.
- Boranové nebo karboranové klastry jako dvourozměrné struktury samoorganizované na površích s využitím při ochraně povrchů kovů a pro design funkčních nanosystémů pro molekulární rozpoznávání nebo elektroniku.
- Teoretická chemie polyhedrálních boranů využívající elektronovou difrakci ke stanovení elektronických struktur heteroboranů a predikci vhodných míst k možné substituci.
- Chemie (poly)heterocyklických sloučenin zaměřená na syntézu nových heterocyklických sloučenin obsahujících bór, křemík, germanium, cín, kyslík, síru a dusík v různých kombinacích s potenciálním využitím v molekulární elektronice.

## Nové materiály pro udržitelné životní prostředí

Výzkumné úsilí je směřováno na vývoj nových materiálů pro environmentální aplikace při čištění kontaminovaného vzduchu, povrchových vod a půdy v reálných podmínkách, zvyšování jejich účinnosti a snížení energetické náročnosti. Studovány byly především

- Nanokompozitní materiály na bázi  $\text{TiO}_2$  s jinými oxidy nebo jinými nízkodimenzionálními komponentami, které zvyšují fotokatalytickou účinnost nebo přidávají další využitelné funkce výslednému kompozitu. U nich pak studujeme účinnost rozkladu vybraných polutantů vod (pesticidy, zbytky léčiv, endokrinní disruptory) a ovzduší (zejména VOC, organofosforečné látky).
- Nanostrukturní oxidy zejména na bázi oxidu ceričitého  $\text{CeO}_2$ , který váže a spontánně rozkládá organofosforečné sloučeniny jako jsou pesticidy nebo nervově paralytické bojové chemické látky (typu Sarin, Soman, látka VX). Dále má tzv. pseudo-enzymatickou aktivitu a může štěpit fosfodiesterové vazby v biomolekulách pro medicínské aplikace. Proto vyvíjíme nenáročné metody jeho přípravy i ve velkém měřítku (stovky gramů a více), řídíme velikost jeho částic a jeho degradační aktivitu ve výše zmíněných reakcích.
- Sorbenty radionuklidů (těžké kovy a selen), které jsou na bázi kyseliny metatitaničité modifikované grafen oxidem. Tento materiál je také testován na antibakteriální účinky vůči *E. Coli*. Zeolit modifikovaný grafenem, grafen oxidem a iontovými kapalinami je studován především pro sorpci uranu a těžkých kovů.

- Vrstevnaté materiály jako grafeny a podvojně vrstevnaté hydroxidy modifikované iontovými kapalinami s využitím pro polymerní materiály. Dále MAX a MXene nanolamináty jako materiály s vysokou mechanickou odolností po  $\text{Ne}^+/\text{He}^+$  bombardování.
- Porézní koordinační polymery (metal-organické sítě - MOF): jejich stabilita ve vodném prostředí a vývoj nových MOFů založených na ligandech nesoucích fosfinátové koordinační skupiny a trojmocných kovech (např.  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$ ), které mají velkou variabilitu ve velikosti pórů a mohou být nosiči různých funkčních skupin. Kromě laditelné funkcionality tyto materiály vykazují vysokou stabilitu ve vodném prostředí. Jsou testovány pro separace plynů, jako sorbenty emergentních polutantů (bisfenol A), nebo jako materiály mající protonovou vodivost.
- Multiferroické a termoelektrické materiály na bázi oxidů  $\text{Fe(III)}$  ve formě orientovaných tenkých vrstev a keramik.

### Ochrana kulturního dědictví

Příspěvkem ke snaze o zachování kulturního dědictví je interdisciplinární výzkum výtvarného umění využívající poznatků moderní anorganické a analytické chemie. Tento výzkum zhodnocuje často anonymní díla tím, že přináší nové informace o jejich původu prostřednictvím pokročilé analýzy malířských materiálů a technologií. Pro tento účel vyvíjí stále nové metodické postupy s akcentem na analýzu neinvazivní, nepoškozující vzácné dílo. V rámci dlouhodobého experimentálního výzkumu se pak popisují mechanismy degradací barev projevující se například změnami barevnosti nebo ztrátou koheze, a hledají se jejich příčiny. To pak vedle zhodnocení díla vede i k návrhu jeho další ochrany či restaurování.

Příkladem aplikace a komplementarity nových postupů neinvazivní mikroanalýzy může být rozsáhlý výzkum miniaturních portrétů 17. - 19. století z českých sbírek, které dosud nebyly vědecky zkoumány – především kvůli choulostivosti a křehkosti podložky (většinou slonovina) a také velmi detailní a kompaktní malbě neumožňující žádný odběr vzorků. Vedle přenosných spektroskopických přístrojů a velkoplošných skenerů, byla k analýze těchto malých objektů vůbec poprvé použita laboratorní prášková rtg. difrakce a environmentální skenovací elektronová mikroskopie. Bylo dosaženo řady překvapivých a originálních výsledků – např. byl nalezen pigment specifický pouze pro miniaturní malbu – tzv. Cassiův purpur tvořený nanočásticemi zlata, nebo byl zmapován výskyt olovnatých mýdel dokládající interakci olovnatých pigmentů s olejovým pojivem. Dalšími projevy degradací byly transformace pigmentů na bázi  $\text{As}$  (realgaru a auripigmentu).

### Geochemická analýza sedimentů

Geochemická analýza mořských, jezerních, říčních a přehradních sedimentů je interdisciplinární věda kombinující poznatky a metody chemické analýzy, anorganické chemie, geomorfologie a geologie. Výzkum byl zaměřen na tyto oblasti:

- Odlišení vlivu klimatu na složení sedimentů od jiných vlivů
- Posouzení vlivu člověka na složení sedimentů
- Pokročilá statistická analýza geochemických dat



## Aplikovaný výzkum

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

- Fotokatalytické  $\text{SiO}_2\text{--TiO}_2$  kompozity a nanosoly ZnO se samočisticími vlastnostmi pro sanace povrchů budov kontaminovaných řasami nebo plísněmi.
- Kombinované materiály pro radiační stínění a stínění sekundárního ionizujícího záření.
- Speciální betony včetně anorganických materiálů na bázi původních matric určených pro jaderný průmysl.
- Nátěrové systémy pro nové technologie sanace betonů v jaderném průmyslu.
- Anorganické systémy pro technologii 3D tisku.
- Kompozitní (nano)materiály s vysokou sorpční schopností pro radionuklidy a těžké kovy.
- Materiály na bázi grafenu s vysokou odolností vůči UV záření a teplotě.

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

Nejvýznamnější výsledky byly v r. 2020 získány především v oblastech materiálové chemie a chemie boranových sloučenin:

- Představili jsme nové oktaedrické molekulové klastrové komplexy s jádrem  $\{\text{Mo}_6\text{I}_8\}$  a netradičními apikálními ligandy (crown ether, cholová kyselina, ethylen oxid karboxylová kyselina), které dávají komplexům požadované vlastnosti jako je vysoká rozpustnost ve vodném prostředí, chemická stabilita, luminiscence, produkce singletového kyslíku a nízká temná toxicita. Tyto komplexy se koncentrují v rakovinových buňkách a po ozáření světlem produkují vysoce toxický singletový kyslík, který buňku zničí. Zmíněné komplexy jsou fototoxické i v přítomnosti sérových proteinů. Jsme také průkopníky ve využití  $\{\text{Mo}_6\text{I}_8\}$  komplexů ve fotodynamické terapii indukované rentgenovým zářením, což umožňuje snížení dávky ionizujícího záření nezbytné k destrukci nádorových buněk. Prokázali jsme radiotoxické efekty komplexů pro Hep-2 buňky a *in vivo* experimenty na myších stále probíhají. Provedli jsme první *in vivo* analýzu toxicity  $\{\text{Mo}_6\text{I}_8\}$  komplexu na myším modelu. Také jsme elektroforeticky připravili vrstvy komplexů na ITO skle a prokázali, že tyto vrstvy fotoinaktivují biofilmy po ozáření viditelným světlem. Naše sloučeniny mohou být využity ve fotodynamické terapii, fotodynamické terapii indukované rentgenovým zářením a při antimikrobiální fotodynamické terapii.

- Rozšíření skupiny fosfinátových MOFů (tzv. ICR, tj. Inorganic Chemistry Rez) a získání nových informací o stabilitě MOFů ve vodných prostředích hlavně v biologických pufrech. Podařilo se dále zvětšit velikosti pórů pomocí prodlouženého bisfosfinátového linkeru a připravit fosfinátové MOFy s funkčními skupinami. Také jsme ukázali, že hydrofobní fosfinátové MOFy efektivně sorbují a odstraňují emergentní polutanty a že fosfinátové MOFy s hydrofilními skupinami v pórech jsou dobrými vodiči protonů. Dokončili jsme systematickou koordinační studii bisfosfinátových linkerů s dvojmocnými kovy, analyzovali stabilitu struktur některých

MOFů ve vodném prostředí, abychom poukázali na jejich limity, a ukázali nové trendy ve stabilitě MOFů v závislosti na jejich složení. Také jsme rozvinuli a využili novou metodiku stanovení stability zirkoničitého MOFu UiO-66 v běžně používaných pufrech.

- Vyvinuli jsme srážecí metodu pro přípravu velmi dobře krystalických nanočástic  $\text{CeO}_2$  za laboratorní teploty, u kterých byla experimentálně prokázána vysoká degradační aktivita vůči organofosfátovým pesticidům a tzv. pseudo-enzymatická aktivita. Popsali jsme i možnost částečné regenerace adsorbentu na bázi  $\text{CeO}_2$  pomocí vody a běžných rozpouštědel, tak aby byl znovu použitelný k degradačním reakcím.

- Připraveny tenké vrstvy hexagonálních feritů typu W vykazující jev spinové reorientace a spinový Seebeckův efekt, popis přechodu kov-isolátor v daleké IR oblasti u keramik a tenkých vrstev kobaltitů se směsnou valencí a anomálního Nerstova jevu v keramikách a tenkých vrstvách La-Sr kobaltitových perovskitů.

- Ověřena příprava nových anorganických materiálů pro stínění ionizujícího záření a materiálů pro stínění neutronů technologií lisováním. Také byly popsány materiály typu MAX, tj. vybrané hexagonální vrstevnaté karbidy. Některé ze studovaných materiálů vykazují mimořádnou odolnost vůči ozařování vysokoenergetickými částicemi, a proto mají potenciální využití jako materiály pro úpravu povrchů radiačně namáhaných komponent.

- Vyvinuli jsme efektivní iontoměniče tyčinkovité morfologie na bázi Li, Na a K titanátů na odstranění Pb, Cd, Cu a Mn z vodného prostředí. Povrchové úpravy  $\text{TiO}_2$  vedly ke zlepšení jeho fotokatalytické aktivity i na rozklad vody a vývoj vodíku. Byla vyvinuta levná a efektivní metoda na odstranění iontových nečistot grafen oxidu. Podářilo se připravit MXen fáze pomocí iontového bombardování.

- Byla ověřena účinnost zcela jednoduchého a ekologického způsobu ochrany zateplených fasád před jejich napadením řasami a plísněmi. Připravuje se ochrana tohoto výsledku patentem. Dále, ve společném projektu s firmou Prefa kompozity, a.s. byl vyvinut transparentní nátěr s planárním UV-stabilizátorem (funkční vzorek a ověřená technologie) a ověřena jeho poloprovozní výroba.

- Bylo popsáno několik nových tříd (metala)karboranových inhibitorů enzymu CA-IX a vliv řady strukturních faktorů na jejich aktivitu. Látky vesměs vykazují subnanomolární hodnoty  $K_i$  v enzymatických testech, nízkou toxicitu, dobrou farmakokinetiku a nadějný účinek *in-vivo* na myším modelu a mají nadějný potenciál pro vývoj protinádorových léčiv.

- Na teoretické úrovni byly prostudovány reakční mechanismy 10-ti vrcholových kloskarboranů s bázemi, při nichž dochází ke skeletálním transformacím za otevření skeletu. Byly připraveny nové, unikátní polymethylované deriváty nido-dekarboranu, jejichž struktury byly stanoveny pomocí rentgenové difrakční analýzy a chemických výpočtů.

- S využitím kombinace experimentálních a teoretických metod byly prostudovány fotofyzikální vlastnosti nového organicko-anorganického modře emitujícího laserového barviva, které je založeno na alkylaci makropolyhedrálního boranového klastru *anti*- $\text{B}_{18}\text{H}_{22}$ .

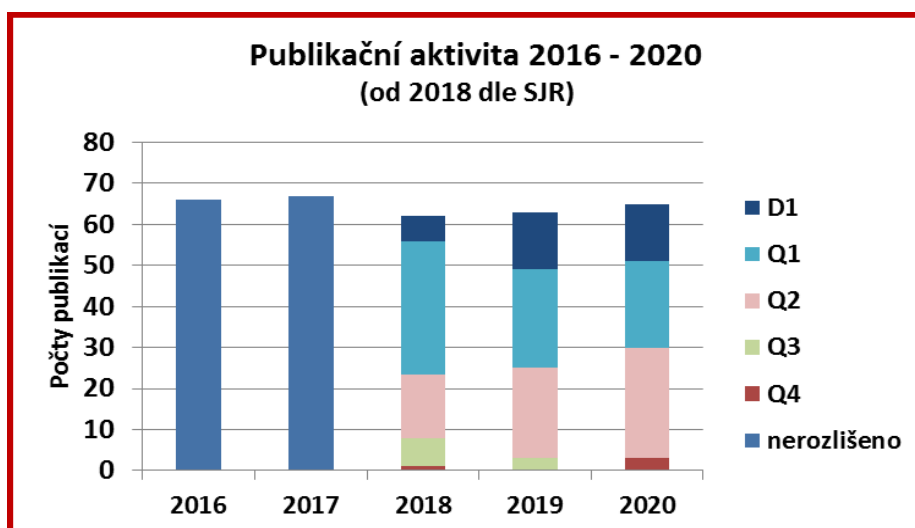
- Dále byla připravena série nových jodovaných derivátů *anti*- $\text{B}_{18}\text{H}_{22}$ , byly určeny

jejich struktury a prostudovány fotofyzikální vlastnosti, elektronická struktura a použití jako fotosensitivních látek pro generování singletového kyslíku.

- Byla vyvinuta a popsána nová sekvence reakcí na klastrovém sendvičovém kobalta bis(dikarbollid)ovém iontu, která umožňuje dosud nedostupné vnesení tetrazolových kruhů jako mimetik karboxylových skupin. Látky byly strukturně charakterizovány. Výsledek je využitelný při vývoji nových typů léčiv.

- Byla prostudováno samoskladné uspořádání karboranů heterosubstituovaných karboxylovou a thiolovou skupinou na povrchu zlata. Byla vysvětlena role dipolárních interakcí na molekulární orientaci na povrchu a prostudována acidita karboxylových skupin na površích. Výsledek má relevanci pro vývoj orientovaných vrstev s polární skupinou na povrchu kovu.

Získané výsledky byly v roce 2020 zveřejněny v 65 publikacích v mezinárodních časopisech, jejichž kvalita odpovídá většinou prvnímu decilu D1 (14 článků), a prvnímu kvartilu Q1 (21 článků) v oboru (dle JCR). Na následujícím obrázku je znázorněn vývoj počtu publikací pracovníků ústavu v období 2016–2020.

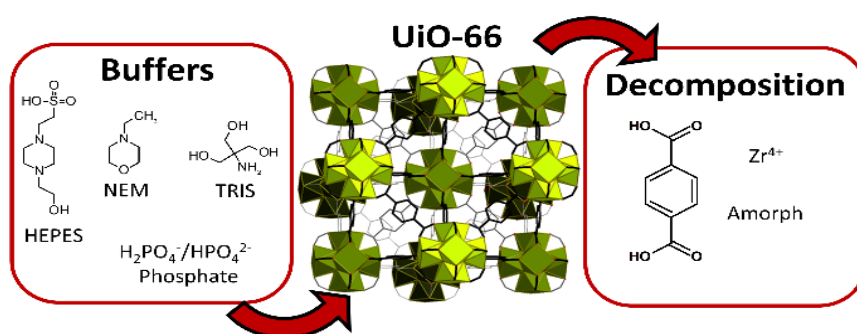


Ve více než polovině prací kvality D1 a Q1 jsou ústavní autoři též autory korespondujícími.

## Významné výsledky s uvedením citací:

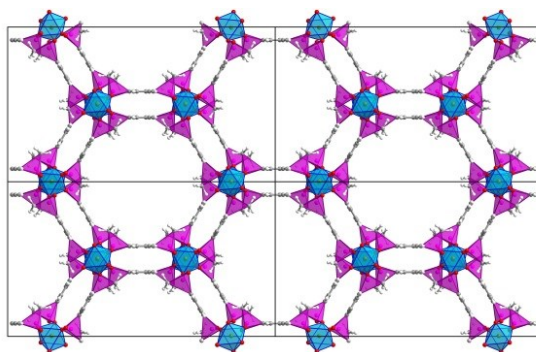
### (1) Stabilní metaloorganické sítě (MOFy) pro environmentální aplikace

Nevýhodou porézních koordinačních polymerů (MOFů) je jejich nízká stabilita ve vodném prostředí. Popsali jsme stabilitu často užívaného MOFu UiO-66 v pufrách pro medicínské aplikace a vypracovali doporučení pro práci s UiO-66 v pufrách [1]. V navazující práci připravili nové ve vodě stabilní MOFy založené na fosfinátových koordinačních skupinách. Doposud byly na přípravu MOFů použity linkery nesoucí karboxylové kyseliny (RCOOH), fosfonové kyseliny (RPO<sub>2</sub>H<sub>2</sub>), nebo N-donující skupiny. Použití fosfinátových kyselin (R<sub>2</sub>POOH) otevírá nové možnosti přípravy porézních materiálů s laditelnou velikostí pórů. Tyto materiály mohou najít uplatnění například pro uchovávání a separaci plynů nebo jako sorbent nebezpečných organických polutantů z vody [2,3].



#### Stabilita UiO-66 v pufrách

Kombinace zirkoničitého MOFu s pufrý vedle porušení struktury



#### Struktura fosfinátového MOFu ICR-2

Oktaedricky koordinované atomy železa jsou modré a fosfinátové tetraedry jsou fialové.

[1] Bůžek, D., Ondrušová, S., Hynek, J., Kovář, P., Lang, K., Rohlíček, J., Demel\* J.: Robust Aluminum and Iron Phosphinate Metal–Organic Frameworks for Efficient Removal of Bisphenol A, *Inorganic Chemistry* (2020), **59**, 5538–5545. JCR/D1

[2] Bůžek, D., Adamec, S., Lang, K., Demel, J.: Metal-organic frameworks vs. buffers: Case study of UiO-66 stability, *Inorganic Chemistry Frontiers*, Doi: 10.1039/D0QI00973C. JCR/D1

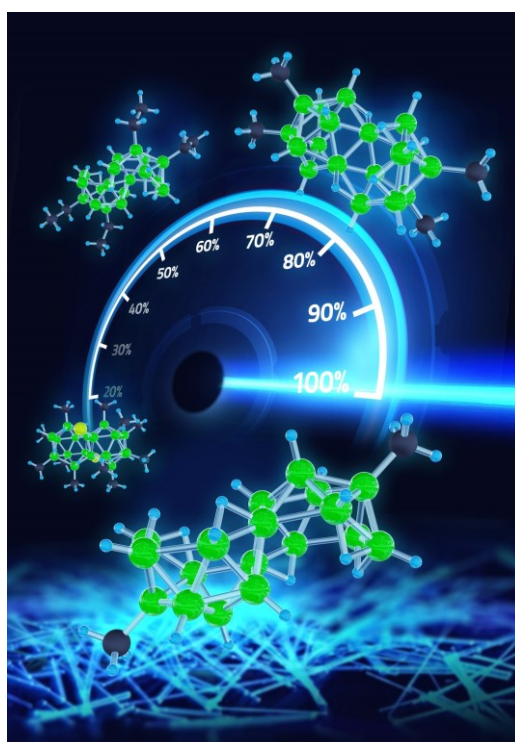
[3] Kloda\*, M., Ondrušová, S., Lang, K., Demel\*, J.: Phosphinic acids as building units in materials chemistry, *Coordination Chemistry Review*, Doi: 10.1016/j.ccr2020.213748. JCR/D1

Spolupracující subjekt: UJEP a FZU AV ČR

## (2) Ultra-zářivé boranové klastrové luminofory: nové vysoce stabilní anorganické emitory modrého světla

Stabilní zdroje modrého světla jsou důležité pro mnoho zařízení, která denně používáme. Představujeme novou sérii anorganických molekul schopných produkovat modré světlo se 100 % účinností.

Když molekuly absorbují energii, stanou se excitovanými. Ve svém excitovaném stavu mohou tyto molekuly dělat nejrůznější fascinující věci: vyzařovat laserové světlo, energizovat kyslík, podstupovat chemické změny ... a to vše v mžiku kvantového skoku – miliardtiny sekundy. Naše práce využívá nové syntézy, pečlivou spektroskopickou analýzu a výpočty k vyřešení těchto nanosekundových aktivit a poskytuje hluboké pochopení excitovaných stavů klastrových molekul boranů a ultraúčinných zdrojů modrého světla



### Ultra-zářivé boranové klastrové luminofory

Alkylované deriváty makropolyedráního hydridu boru, *anti*-B<sub>18</sub>H<sub>22</sub>. Nové sloučeniny jsou vysoce stabilní a převádějí UVA záření na modré světlo se 100 % účinností!

[1] Londesborough\*, M.G.S., Lang, K., Clegg, W., Waddell, P.G., Bould J.: Swollen polyhedral volume of the *anti*-B<sub>18</sub>H<sub>22</sub> cluster via extensive methylation: *anti*-B<sub>18</sub>H<sub>8</sub>Cl<sub>2</sub>Me<sub>12</sub> *Inorganic Chemistry* (2020), **59**, 2651-2654; JCR/D1

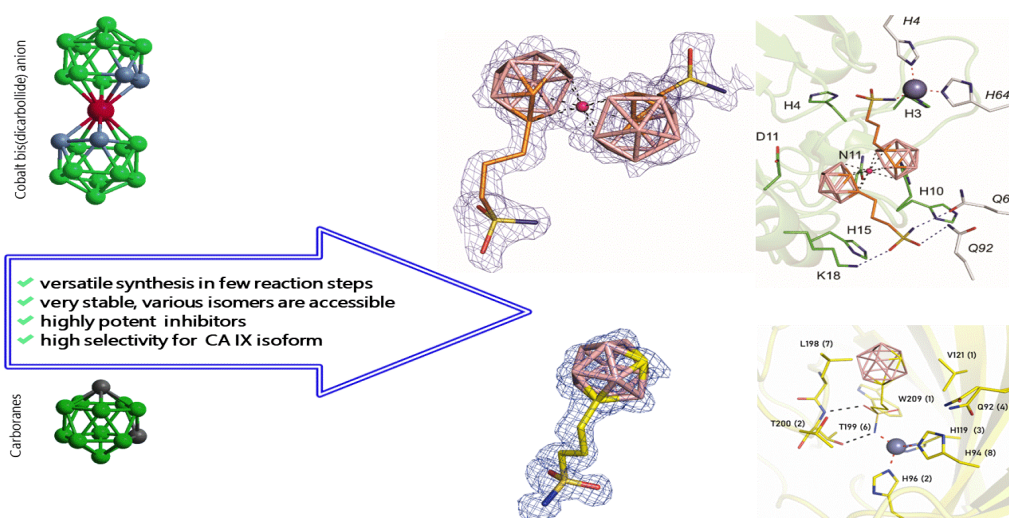
[2] Cerdán\*, L., Francés-Monerris, A., Roca-Sanjuán\*, D., Bould, J., Dolanský, J., Fuciman, M., Londesborough\*, M.G.S.: Unveiling the role of upper excited electronic states in the photochemistry and laser performance of *anti*B<sub>18</sub>H<sub>22</sub>. *Journal of Materials Chemistry C* (2020), **8**, 806-12818; JCR/Q1

[3] Bould\*, J., Lang, K., Kirakci, K., Cerdán, L., Francés-Monerris, A., Roca-Sanjuán, D., Clegg, W., Waddell, P.G., Fuciman, M., Polivka, T., Londesborough\*, M.G.S.: A series of ultra-efficient blue borane fluorophores. *Inorganic Chemistry*, **2020**, **59**, 17058-17070. JCR/D1

Spolupracující subjekt: Institute of Physical Chemistry, CSIC, Madrid, Španělsko; Univ. Valencia, Španělsko; Univ. Newcastle, UK; Jihočeská univerzita.

### (3) Nové inhibitory enzymu karbonická anhydráza IX (CA IX) založené na 3D karboranových klastrech

Modifikací karboranu a kobalt bis(dicarbollidu) byly navrženy a připraveny netradiční typy inhibitorů enzymu CA IX. Tento enzym hraje klíčovou úlohu v proliferaci nádorových buněk a při vzniku metastáz. Nová rodina účinných a selektivních inhibitorů kombinuje ve struktuře motiv objemného anorganického klastru s alkylsulfonamidovou skupinou pro vazbu k atomu  $Zn^{2+}$  v aktivním místě. Inhibitory jsou schopny redukovat růst nádoru, a tudíž mají perspektivu pro vývoj léčiv.



#### Karboranové a metallakarboranové inhibitory enzymu CA IX

Ilustrace schematicky ukazuje vývoj inhibitorů z mateřských klastrů a jejich vazbu v aktivním místě enzymu, určenou na základě strukturních studií.

Dvořanová, J., Kugler, M., Holub, J., Šícha, V., Das, V., Nekvinda, J., El Anwar, S., Havránek, M., Pospíšilová, K., Fábry, M., Král, V., Medvedíková, M., Matějková, S., Lišková, B., Gurská, S., Džubák P., Brynda, J., Hajdúch, M., Grüner, B., Řezáčová, P.: Sulfonamidocarboranes as highly selective inhibitors of cancer-specific carbonic anhydrase IX, *European Journal of Medicinal Chemistry* (2020), Article No. 112460. JCR/D1

Kugler, M., Holub, J., Brynda, J., Pospíšilová, K., El Anwar, S., Bavol, D., Havránek, M., Král, V., Fábry, M., Grüner\*, B., Řezáčová\*, P.: The structural basis for the selectivity of sulfonamido dicarbaboranes towards cancer-associated carbonic anhydrase IX, *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry* (2020), **35**, 1800-1810. JCR/Q1

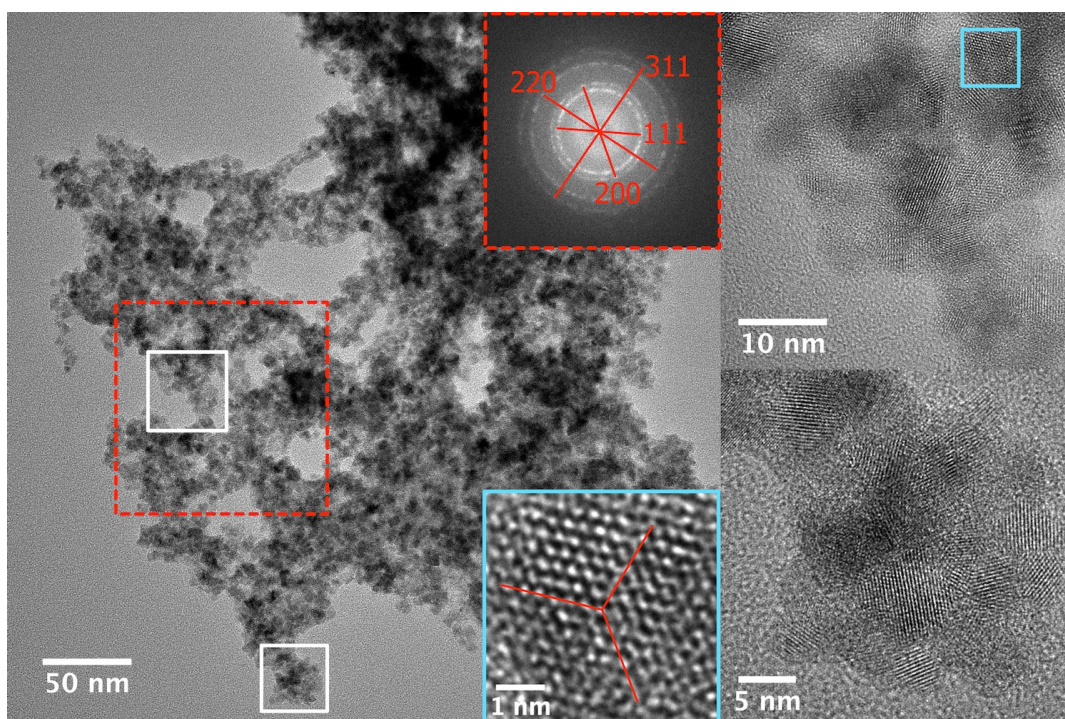
Nekvinda, J., Kugler, M., Holub, J., El Anwar, S., Brynda, J., Pospíšilová, K., Růžičková, Z., Řezáčová\*, P., Grüner, B.: Direct introduction of alkylsulfonamido group on C-sites of three isomeric carbaboranes; the influence of stereochemistry on inhibitory activity against cancer-associated Carbonic Anhydrase IX isoenzyme supported by protein-inhibitor structures, *Chemistry A - European Journal* (2020), **26**, 16541-16553. JCR/Q1

Grüner\*, B., Kugler, M., El Anwar, S., Holub, J., Nekvinda, J., Bavol, D., Růžičková, Z., Pospíšilová, K., M. Fábry, V. Král, J. Brynda, Řezáčová\*, P.: Cobalt Bis(dicarbollide) Alkylsulfonamides: Potent and Highly Selective Inhibitors of Tumor Specific Carbonic Anhydrase IX, *ChemPlusChem* (2020), **85**, published on web in September 2020. *Invited article, Cover Page.* JCR/Q2

Spolupracující subjekt: ÚMG AV ČR a ÚOCHB AV ČR (*in vitro* testy a strukturní studie), ÚMTM při LF ÚPOL (buněčné a *in vivo* testy).

#### (4) Nanostrukturní CeO<sub>2</sub>, jeho degradační aktivita vůči organofosforečným pesticidům, pseudo-enzymatická aktivita a nenáročná regenerace

Snadná srážecí metoda za laboratorní teploty, vhodná k přípravě i stogramových množství materiálu, byla vyvinuta k přípravě agregovaných nanočástic CeO<sub>2</sub>. Experimentálně byla prokázána vysoká degradační účinnost těchto částic vůči organofosforečným pesticidům a byla popsána možnost jejich částečné regenerace ve vodě. Takto připravené nanočástice dále vykazují tzv. pseudo-enzymatickou aktivitu a jsou schopny štěpit fosfodiesterové vazby v biomolekulách, čehož lze využít k terapeutickým účelům.



Snímky uniformních nanočástic CeO<sub>2</sub> pořízené elektronovým mikroskopem

Velmi dobře krystalické uniformní nanočástice CeO<sub>2</sub> s průměrnou střední velikostí kolem 5 nm byly připraveny srážecí metodou při běžné laboratorní teplotě. Malá velikost a dobrá krystalická struktura zajišťují vysokou reaktivitu nanočástic vůči různým molekulám na bázi organofosforečnanových látek.

Tolasz\*, J., Henych, J., Šťastný, M., Mazanec, K., Němečková, Z., Šrámová Slušná M., Opletal, T., Janoš, P.: Room-temperature synthesis of nanocerium for degradation of organophosphate pesticides and its regeneration and reuse. *RSC Advances* (2020), **10**, 14441. JCR/Q2

Spolupracující subjekt:

Univerzita J.E. Purkyně v Ústí nad Labem, Vojenský výzkumný ústav Brno s.p.,

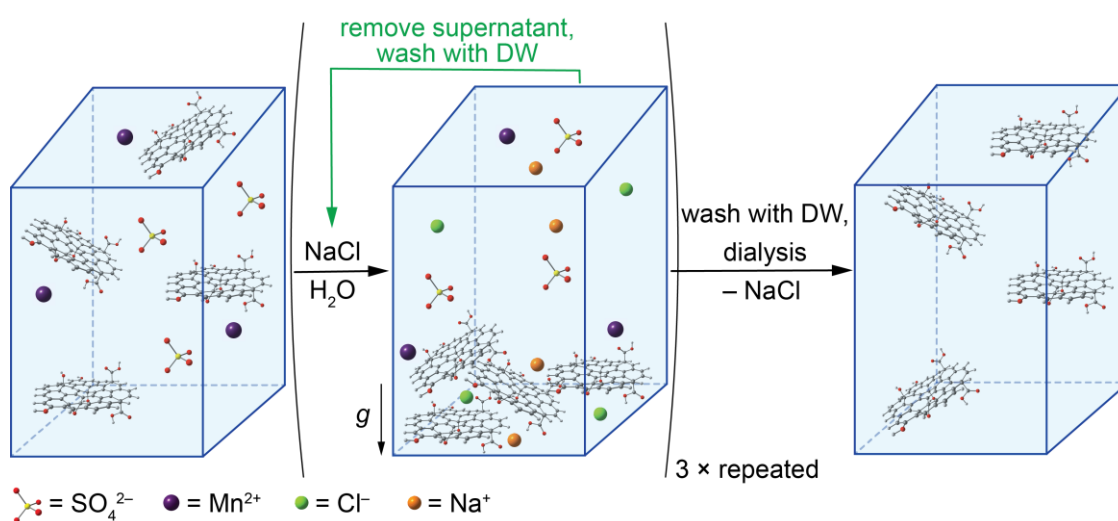
## (5) Solí promytý grafen oxid a jeho cytotoxicita

Při přípravě grafen oxidu je nutné klást důraz na čistotu. Zásadní je, aby metoda čištění byla jednoduchá a levná s výhledem na využití ve velkém měřítku.

Nová technika, tzv. čištění solí je založena na následujících krocích:

- shlukování grafen oxidových (GO) lístků s použitím NaCl solí,
- čištění agregátů deionizovanou vodou a
- odstranění zbylé soli re-dispergací čistého GO.

Solí promytý GO (swGO) nezměnil svou morfologii. Způsobnost swGO pro biologické aplikace byla testována na fibroblastických buněčných kulturách. IC50 hodnoty ukázaly silnou korelaci mezi čistotou vzorku a cytotoxicitou.



### Schématické znázornění vyvinuté procedury promývání solí

Zjednodušené znázornění procedury čištění, ve které se přidává solný roztok, kde disociované ionty vytěsňují pevně interkalované Mn<sup>2+</sup> ionty, poté následuje promytí vodou.

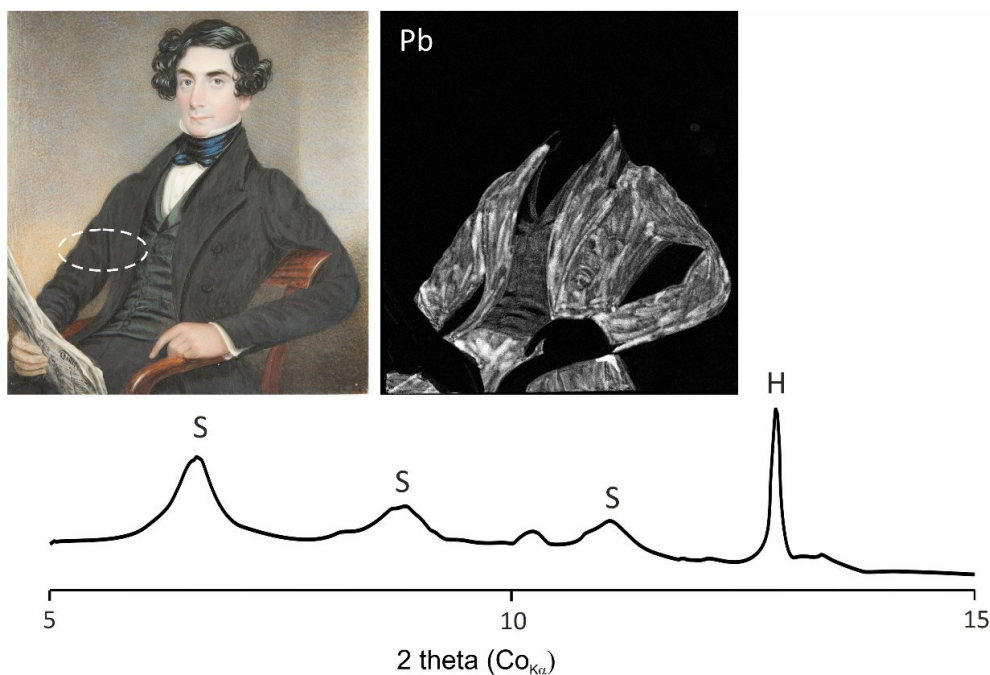
Mrózek\*, O., Melounová, L., Smržová, D., Machálková, A., Vinklárěk, J., Němečková, Z., Komárková B., Ecorchard, P.: Salt-washed graphene oxide and its cytotoxicity, *Journal of Hazardous Materials* **398** (2020), 123114. JCR/Q1

Spolupracující subjekt: FCHT Univerzita Pardubice; PŘF a LF v Hradci Králové, UK; PŘF Ostravská univerzita.



## (6) Neinvazivní analýza malovaných miniatur a jejich degradací

Miniaturní portréty jsou zcela specifickou cestou v evropském malířství. Od 16. století v Anglii a pak postupně v dalších evropských zemích (Francie, Rakousko) se staly oblíbenými zejména u šlechtických rodin – v 18. a 19. století byly nejčastěji malovány na slonovinové destičky. Právě choulostivost a křehkost slonoviny a také velmi detailní a kompaktní malba neumožňující žádný odběr vzorků limitovaly po dlouhou dobu jakýkoliv materiálový výzkum analytickými přístroji. Nám se v letošním roce podařilo zodpovědět celou řadu důležitých otázek s využitím pokročilé neinvazivní techniky – například prokázat použití specifických pigmentů (nanočástice zlata) nebo určit společnou přítomnost více typů organických pojiv. I když bylo drobné dílko domnělým akvarelem, olovnatá běloba byla záměrně pojena olejem – zřejmě aby se zabránilo jejímu černání. Tento postup však nechtěně způsobil degradaci jinou – tvorbu kovových olovnatých mýdel (saponifikaci), vážně ohrožující soudržnost malby. Karboxyláty olova, prokazující přítomnost degradovaného oleje, byly v miniaturní malbě zjištěny vůbec poprvé. V akvarelech je nikdo ani nepředpokládal. Díky práškové rtg. difrakci, použité pro analýzu malých malovaných portrétů také poprvé, byla kovová mýdla rozpoznána i ve spodních vrstvách – například v podmalbě.



### Kombinace velkoplošného XRF skeneru (AVU Praha) a rtg. difrakce (ÚACH) při neinvazivním výzkumu miniaturního portrétu na slonovině z 19. století (Oblastní muzeum v Chomutově).

Mapa distribuce Pb dokládá přítomnost olovnaté běloby v podmalbě tmavého pláště, zatímco ve světlech (košile, inkarnát) byla využita barevnost slonovinové podložky a běloba barytová.

Difrakční měření v označeném místě pak prokazuje přítomnost Pb karboxylátů (S) vedle hydrocerussitu – olovnaté běloby (H).

Garrappa, S., Hradil\*, D., Hradilová, J., Kočí, E., Pech, M., Bezdička, P., Švarcová, S.: Non-invasive identification of lead soaps in painted miniatures. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* (in press). DOI: 10.1007/s00216-020-02998-7

Spolupráce: Akademie výtvarných umění v Praze.

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

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

### Bakalářské a magisterské studijní programy:

Pracovníci ústavu se v r. 2020 podíleli na zajištění přednášek, seminářů a vedení prací v pregraduálních programech Chemie (PřF UK v Praze), Geologie (PřF UK v Praze), Ekologie a ochrana prostředí (FŽP UJEP v Ústí nad Labem), Chemie a analytická chemie životního prostředí a toxikologie (PřF UJEP v Ústí nad Labem). Působí rovněž ve zkušebních komisích.

V průběhu letního semestru 2019/2020 a zimního semestru 2020/2021 přednášeli pracovníci ústavu v uvedených programech více než 300 hodin.

### Doktorské studijní programy:

V rámci společných akreditací s:

VŠCHT v DSP Chemie a chemické technologie,

PřF UK v DSP Chemie,

PřF Ostravské univerzity v DSP Analytická chemie heterogenních procesů,

FŽP a PřF Univerzity J. E. Purkyně v Ústí nad Labem v DSP Environmentální analytická chemie a Aplikované nanotechnologie a

Univerzity Pardubice v DSP Anorganická chemie a Anorganická technologie

se pracovníci ústavu podíleli na výuce a vedení doktorských prací a působili v oborových radách a zkušebních komisích těchto DSP. Mimo uvedené akreditace se pracovníci ústavu podílejí na výuce a vedení prací v DSP Geologie (PřF UK) a v DSP Chemie (Masarykova univerzita)

V r. 2020 pracovalo pod supervizí ústavních školitelů 14 studentů DSP, z nichž 1 ukončil studium úspěšnou obhajobou disertační práce. Na řešení výzkumných projektů se účastnili rovněž studenti magisterských programů.

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

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

#### 3a-1) Transparentní nanohybridní systémy s mimořádnou odolností proti UV záření a extrémním teplotám

Partner: TOSEDA s.r.o

Poskytovatel: MPO (projekt FV10480, program TRIO)

Dosažený výsledek: V laboratorním měřítku byla ověřena příprava kvantových teček na bázi grafenu a redukovaného grafen oxidu. Modifikovaný postup přípravy obou materiálů v požadovaných rozpouštědlech (DMA, DMF a NMP) umožňuje jejich snadnou dispergaci do hydrofobního prostředí polymeru. Jedině vysoká kvalita dispergace umožní připravit nanohybridní systém mimořádných vlastností, jako je vysoká absorpce světla v blízké UV oblasti a odolnost vůči extrémním teplotám. Uplatnění připravených materiálů se předpokládá v systémech odolávajícím velmi agresivním kosmickým podmínkám panujícím na nízkém orbitu Země.

### 3a-2) Původní konstrukční anorganické materiály pro jaderný průmysl a úložiště

Partner: Centrum výzkumu Řež s.r.o.; ÚJV Řež, a. s.; Katedra anorganické chemie, PřF UK, Praha

Poskytovatel: TAČR (projekt TK03020188)

Dosažený výsledek: Byla vyvinuta původní syntéza konstrukčních nízkoalkalických materiálů s nízkými výluhy. Tyto materiály jsou určeny pro jaderná úložiště

### 3a-3) Nové kompozitní nanomateriály na bázi recyklovatelného tuhého odpadu

Partneři: ÚJV Řež, a.s. Precheza, a.s.

Poskytovatel: TAČR (projekt TH02020110, program EPSILON)

Dosažený výsledek: Byl vyvinut postup syntézy směsného nanomateriálu na bázi titanátu sodného a odpadů (žíhané dřevěné štěpky) a stanovena sorpční schopnost pro radionuklidy (Cs, Sr, Eu, Co, U). Sorbenty jsou určeny pro čištění odpadů z jaderných zařízení a odstraňování těžkých kovů z životního prostředí.

### 3a-4) Ochrana polymerních vrstev a jejich podkladů proti UV degradaci pomocí kvantových teček

Partner: ROKOSPOL, a.s.

Poskytovatel: MPO (projekt FV10027, program TRIO)

Dosažený výsledek: Hlavním výsledkem projektu je funkční vzorek polymerního pojivového systému s obsahem fotoluminiscenčních grafenových kvantových teček (GQDs) s vlastnostmi UV stabilizátoru. Nově vyvinuté technologie přípravy polymerního pojivového systému byly v roce 2020 úspěšně přeneseny do poloprovodního měřítká. Uplatnění těchto pokročilých materiálů se předpokládá v oboru nátěrových hmot.

### 3a-5) Vývoj transparentního nátěru s UV-stabilizátorem; výrobní postup pasty s UV stabilizátorem

Partner: PREFA KOMPOZITY, a. s.

Poskytovatel: TAČR (projekt TH03020066, program EPSILON)

Dosažený výsledek: Byla popsána výrobní technologie jak transparentního nátěru s UV-stabilizátorem tak pasty s UV-stabilizátorem na základě výsledků z předchozích experimentů. Transparentní nátěr s UV-stabilizátorem je určen k ochraně povrchů citlivých na UV-degradaci. Pasta s UV-stabilizátorem je určena pro výrobky, u kterých je vhodné ať už z hlediska technologie výroby nebo použití výrobku rozptýlit UV-stabilizátor v celé mase hmoty výrobku.

### 3a-6) Původní anorganické materiály pro jaderný průmysl

Partner: Centrum výzkumu Řež, s.r.o.

Poskytovatel: TA ČR (projekt TK01030130)

Dosažený výsledek: Byla vypracována syntéza materiálů na bázi geopolymérů s vysokými obsahy funkčních plniv, které jsou vyvíjeny pro sanace jaderných havárií.

3a-7) Fotoaktivní nanokompozitní systémy pro zlepšení životního prostředí (výzkum ovlivnění růstu řas fotokatalýzou)

Partneři: Barvy a laky Teluria, s.r.o., Pragothem, servis fasád, s.r.o., Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Technická univerzita v Liberci

Poskytovatel: TA ČR (projekt TH04030090)

Dosažený výsledek: V roce 2020 pokračovaly práce na optimalizaci složení a postupu aplikace transparentního nanokompozitního systému na bázi nanočástic  $\text{SiO}_2$  a  $\text{TiO}_2$  pro samočisticí úpravu povrchů historicky cenných objektů. Podařilo se dosáhnout významného pokroku zejména z hlediska tzv. bělení nátěrů v průběhu času, které dosud bránilo rozsáhlejšímu využití těchto jinak funkčně bezchybných materiálů. Cílem projektu je zavedení výroby fotokatalytických nátěrových hmot v podniku BaL Teluria Letovice.

3a-8) Inovativní sorbenty na bázi zeolitu modifikovaného iontovou kapalinou pro sorpci a detekci uranu a těžkých kovů

Partner: UJV, a.s.

Poskytovatel: TA ČR (projekt TH04030285)

Dosažený výsledek: Projekt je zaměřen na vývoj sorbentů pro odstraňování radionuklidů (Cs, Sr, U aj.) a těžkých kovů (Pb, Cd) z kontaminovaných vod. V roce 2020 byly připraveny kompozity zeolitu s exfoliovaným grafitem a grafen oxidem, které byly modifikovány vybranými iontovými kapalinami a testovány jak na sorpci uranu, tak na těžké kovy. Vybrané směsi byly použity na přípravu elektrody na detekci uranu.

3a-9) Inovativní fotokatalytické stěrky a přísady do betonu

Partner: Betosan s.r.o., ÚFCH JH AV ČR, Technická univerzita Liberec

Poskytovatel: MPO (projekt FV 20234, TRIO)

Dosažený výsledek: Byl vyvinut postup aplikace fotokatalyticky upravených vzorků křemenného písku pomocí kompozitu na bázi  $\text{SiO}_2 - \text{TiO}_2$ , stanovená fotokatalytická aktivita získaných stěrek a pomocí elektronové mikroskopie byla charakterizována struktura fotokatalytické vrstvy na zrnkách písku a rovněž částic fotokatalyzátoru v objemu stěrky. Cílem projektu je zavedení výroby fotoaktivních stěrek ve firmě Betosan a jejich aplikace při fotoaktivní úpravě betonových povrchů.

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

V r. 2020 byly uzavřeny hospodářské smlouvy se 15 odběrateli a byly řešeny 4 projekty smluvního výzkumu.

Nejvýznamnější výsledky:

3b – 1) Materiály pro jaderný průmysl

Zadavatel: Škoda JS a.s., Plzeň

Anotace: Předmětem smlouvy bylo pokračování ve vývoji funkčních materiálů s definovanými vlastnostmi, které umožňují bezpečnější zpracování jaderných odpadů

a zaručují splnění náročných požadavků současné legislativy v této oblasti

Uplatnění: Jedná se o speciální vysokopevnostní materiály, které mají uplatnění výhradně v jaderném průmyslu.

### 3b – 2) Materiály pro stínění ionizujícího záření

Zadavatel: PRAGO-ANORG s.r.o., Praha

Anotace: Pokračování ve vývoji funkcionalizovaných geopolymerních systémů zajišťující moderaci a absorpci neutronů a efektivní stínění sekundárního gama záření.

Uplatnění: Aplikace materiálů se předpokládá v obraném a jaderném průmyslu, zároveň je lze použít i k civilním účelům.

### 3b – 3) Ekologické betony a malty

Zadavatel: BETONEXT s.r.o., Praha

Anotace: Vývoj a charakterizace betonů a malt jako ekologická a cenově akceptovatelná alternativa ke stávajícím betonům na bázi portlandských slínek.

Uplatnění: Technicky méně náročné stavby a městské mobiliáře

### 3b – 4) Optimalizace technologie výroby oxidu zinečnatého

Zadavatel: Bochemie, a.s.

Anotace: Metodou adsorpce a desorpce plynného dusíku byly stanoveny hodnoty velikosti povrchu a porozity pro zaslané vzorky nanočásticového oxidu zinečnatého vyráběného ve firmě Bochemie a.s.

Uplatnění: Výsledky budou využity na optimalizaci unikátní technologie výroby oxidu zinečnatého s vysokým povrchem.

### 3b – 5) Studie dlouhodobé stability nově vyvíjených látek pro farmacii

Zadavatel: Quinta Analytica, s.r.o.

Anotace: V roce 2020 pokračovaly analýzy látek pomocí práškové rentgenové difrakce, které jsou vyvíjeny zadavatelem pro farmaceutické účely. U těchto látek byla sledována dlouhodobá stabilita aktivních látek, které byly podrobovány různým atmosférickými podmínkám (relativní vlhkost, čas)

Uplatnění: Analýzy jsou součástí výzkumu a vývoje na pracovišti zadavatele.

### 3b – 6) Anorganické nátěry pro úpravu oceli a hliníku

Zadavatel: ÚJEP Ústí n/L, Fakulta strojního inženýrství

Anotace: Pokračování ve vývoji anorganických nátěrů hliníku nebo oceli zajišťující aplikace těchto kombinovaných systémů při vysokoteplotních aplikacích

Uplatnění: Nátěry umožňují zejména řízení adheze povrchů oceli a hliníku při opakovaných aplikacích do 300°C.

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

V r. 2020 byl ústavu udělen jeden patent a dva užité vzory.

#### **3c – 1) Způsob přípravy bezvodých solí aniontu $B_{12}H_{12}^{2-}$ s kationty I.A a II.A skupiny**

Kategorie: patent

Zapsán pod číslem: 308 510

Popis: Původní způsob přípravy nesolvatovaných solí kovů IA a IIA skupiny s ikosaedrickým aniontem  $B_{12}H_{12}^{2-}$

Využití: Kvalifikovaná výchozí surovina pro další syntézy v oblasti boranové medicínské chemie

#### **3c– 2) Fotokatalyticky aktivní povrchová cementová stěrka**

Kategorie: užité vzor

Zapsán pod číslem: 33847

Popis: Užité vzor se týká složení fotokatalyticky aktivní cementové stěrky na betony, u nichž stěrka zajišťuje jejich samočisticí a desinfekční vlastnosti.

Využití: Fotoaktivní stěrku lze využít pro sjednocení a finalizaci povrchů betonových konstrukcí za účelem získání povrchových fotokatalytických samočisticích a desinfekčních vlastností.

#### **3c– 3) Fotokatalyticky aktivní prášková přísada do betonu**

Kategorie: užité vzor

Zapsán pod číslem: 33848

Popis: Užité vzor se týká složení práškové přísady do betonu, v němž přísada zajišťuje fotokatalytickou samočisticí a desinfekční funkci.

Využití: Fotoaktivní beton lze využít pro finalizaci povrchů všech typů betonových prvků nebo betonových prefabrikátů za účelem získání povrchových fotokatalytických samočisticích a desinfekčních vlastností,

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

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

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

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

### **4b) Konference s mezinárodní účastí, které ÚACH spolupřítal**

V r. 2020 se ústav neúčastnil pořádání žádné konference s mezinárodní účastí.

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

- 4c-1) Téma: Klecové molekuly v samo-organizovaných monomolekulárních vrstvách; partner University of California in Los Angeles / California NanoSystems Institute, USA
- 4c-2) Téma: Využití samo-organizovaných monomolekulárních vrstev ve smart textiles; partner Albstadt-Sigmaringen University, Department of Engineering, Textile Product Technology, Německo
- 4c-3) Téma: Výzkum v oblasti luminiscenčních materiálů; partner Instituto de Ciencia de Materials de Sevilla, Španělsko.

#### **4d) Další vědecké spolupráce**

Téma: výzkum fotokatalyzátorů a látek pro stechiometrický rozklad polutantů; partner Uppsala University, Ångströmlaboratoriet, Uppsala, Švédsko.

Téma: vývoj katalyzátorů na bázi směsných oxidů kovů pro rozklad VOC; partner Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry, Bulharská akademie věd, Bulharsko. Bilaterální meziakademická spolupráce.

Téma: výzkum magnetoelektrických vlastností tenkých vrstev hexaferitů; partner: Department of Physics and Astronomy, Seoul National University, Center for Novel States of Complex Materials Research, Seoul National University, Seoul, Jižní Korea.

Téma: vývoj nových MOFů a jejich použití pro separaci plynů; partner: University of Pisa, Itálie.

Téma: světlem indukované antibakteriální a antivirové materiály obsahující kovové klastry; partner: Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Rusko.

Téma: nanočástice tvořené klastry pro teranostiku; partner: Institut des Sciences Chimiques de Rennes (UMR CNRS 6226), Université de Rennes 1, Rennes, Francie. Barrande česko-francouzský výzkumný projekt.

Téma: baktericidní povrchy skel; partner: Research Center for Functional Materials, National Institute for Materials Science (NIMS), 1-2-1 Sengen, Tsukuba, Japonsko.

Téma: chemické výpočty karboranových klastrů, studium jejich interakcí s biomolekulami pomocí výpočtů a hmotnostní spektrometrie; partner: Institute of Chemical Physics, CSIC, Madrid, Španělsko.

Téma: chemické výpočty karboranových klastrů, stanovení struktur karboranů pomocí elektronové difrakce; partner: Universität Bielefeld, Německo.

Téma: laserová fotofyzika týkající se nových boranů; partner: Inst. Química-Física "Rocasolano", CSIC, Madrid, Španělsko.

Téma: syntéza modifikovaných karboranových a metallakarboranových klastrů pro využití pro borovou neutronovou terapii a paramagnetických metallakarboranů pro značení sekvencí DNA; partner: Institute of Medicinal Biology, PAN, Polsko.

Téma: statistické zpracování geochemických dat; partner: Universita Vigo, Španělsko.

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

Účast pracovníků ústavu při uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů je popsána v kapitole 2. Pozornost byla věnována rovněž studentům středních škol, např. v programu AV ČR Otevřená věda, žákům ZŠ (volnočasové aktivity zaměřené na vysvětlení základních přírodních principů a vědeckých poznatků v oblasti přírodních a technických věd hravou formou) a dále rovněž cíleným popularizačním přednáškám.

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

V rámci jiné činnosti byly v r. 2020 uzavřeny smlouvy v hodnotě 790 tis. Kč.

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

V r. 2020 ani v předchozím roce nebyly zjištěny nedostatky v hospodaření.

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

Ústav hospodařil v r. 2020 s vyrovnaným rozpočtem.

Výše institucionální neinvestiční dotace poskytnuté z rozhodnutí zřizovatele v r. 2020 byla přibližně o 1 % vyšší než v r. 2019. Vedle institucionální dotace byla v r. 2020 část rozpočtu ústavu (cca 39 % neinvestičních nákladů) tvořena účelovými prostředky (Horizont 2020, MŠMT, MPO, GA ČR, TA ČR, MK).

Vedení ústavu důsledně dbá na vyhledávání možností aplikací výsledků badatelského výzkumu a uplatňování práv duševního vlastnictví v oblasti aplikovaných výsledků. Kromě smluv o dílo v rámci jiné činnosti (790 tis. Kč, viz výše) byl v r. 2020 v rámci hlavní činnosti realizován smluvní výzkum ve výši 1547 tis. Kč. Výnosy z uzavřených licenčních smluv činily 15 tis. Kč. Příjmy ze smluv a licencí doplňují rozpočet ústavu tvořený převážně dotacemi ze státních prostředků.



## VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště:

Vývoj činnosti pracoviště bude v souladu s jeho posláním a vývojem oboru anorganické chemie v mezinárodním kontextu směřován na výzkum nových sloučenin s potenciálními aplikacemi cílenými na zlepšení kvality života společnosti. Bude reflektovat společenskou poptávku po sloučeninách pro biomedicínské aplikace, (nano)materiálech se specifickými fotokatalytickými, optickými, fotochemickými a baktericidními vlastnostmi a po progresivních keramických materiálech využívajících domácí zdroje surovin. Pozornost bude věnována též řešení environmentálních problémů včetně ochrany a zlepšení životního prostředí, rychlé a účinné degradaci extrémně toxických látek, využití námi vyvinutých sorbentů a jaderné bezpečnosti. Současné vědecké zaměření ústavu sleduje uvedené trendy a svými výsledky spoluurčuje jejich rozvoj. Na badatelský výzkum v řadě případů navazuje výzkum a vývoj s cílem využití výsledků při inovacích stávajících technologických postupů a zavádění nových vyspělých technologií. Hlavní směry výzkumu v roce 2021 vycházejí ze záměrů a výsledků národních a mezinárodních projektů z předchozích let, které mají přesah do roku 2021 a dále.

V oblasti fotoaktivních anorganických molekul a (nano)materiálů budeme pokračovat v designu, přípravě, charakterizaci a ladění jejich fyzikálně chemických, optických, fotofyzikálních, fotochemických a fotobiologických vlastností.

Rozvoj chemie oktaedrických klastrových komplexů  $\text{Mo}_6$ ,  $\text{Re}_6$  a dalších přechodných kovů a popis jejich vlastností. Tyto informace umožní specifikovat optimální složení a využití těchto komplexů pro biologické aplikace. Mnohé z těchto komplexů (biomateriálů) jsou luminiscenční a po ozáření viditelným světlem produkují vysoké výtěžky singletového kyslíku. Budeme je využívat v souvislosti s fotodynamickou terapií rakovinových buněk (PDT), antimikrobiální fotodynamickou terapií a jako senzorů kyslíku. Zaměříme se na:

- Fotodynamická terapie indukovaná rentgenovým zářením (X-PDT) je slibnou metodou vyvíjenou pro léčbu rakoviny. Budeme vyvíjet „core-shell“ nanočástice pro cílenou X-PDT. Nanočástice budou sestaveny z  $\text{Mo}_6$  komplexů, fungujících jako radiosensitizátory, potažených biokompatibilním povrchem s cílicími skupinami na rakovinové buňky. *In vivo* experimenty na myších modelech budou pokračovat.
- Polymerní nanočástice a povrchy s obsahem porfyrinových fotosensitizátorů produkujících singletový kyslík po ozáření viditelným světlem. Budeme studovat světlem indukované antimikrobiální vlastnosti těchto (nano)materiálů.
- Povrchy s antimikrobiálními a antivirovými vlastnostmi. Tato vlastnost je založena na světlem sensitizované produkci cytotoxického singletového kyslíku oktaedrickými klastry přechodových kovů, které se budou používat samostatně, nebo budou zabudované do nanočástic, filmů a textilií.

Ve spolupráci s Univerzitou J. E. Purkyně v Ústí n. Labem (UJEP) se zaměříme na schopnost nanostrukturního oxidu ceričitého  $\text{CeO}_2$  štěpit fosfodiesterovou vazbu v biologických systémech (tzv. pseudoenzymatická aktivita). Tato neobvyčejná vlastnost může sloužit ke sledování a kontrole specifických procesů v buňkách a mohla by tak najít využití v medicínských aplikacích. Vysokou reaktivitou  $\text{CeO}_2$  (ale i jiných oxidů) vůči organofosforečným sloučeninám se budeme také zabývat při vývoji reaktivních sorbentů, schopných vázat a rozkládat vysoce toxické pesticidy a bojové chemické

látky. V nanokompozitních systémech na bázi několika oxidů kovů chceme skloubit reaktivní adsorpci a fotokatalytický rozklad a připravit tzv. bifunkční fotokatalytický adsorbent, který rychleji a důkladněji rozloží výchozí toxické polutanty, ale i méně toxická rezidua, která vznikají samotnou reaktivní adsorpcí. Naše předběžné výsledky také ukazují, že vhodnou modifikací nanočástic  $\text{CeO}_2$  (např. po dopování  $\text{Bi}^{3+}$ ), lze fotokatalyticky neaktivní  $\text{CeO}_2$  přeměnit na vysoce aktivní fotokatalyzátor. Budeme pokračovat ve spolupráci s Fyzikálním ústavem AV ČR na vývoji nanokompozitů oxidů kovů s nanodiamanty (ND). Předběžné výsledky ukazují, že různě modifikované ND mohou výrazně měnit adsorpční a fotokatalytické vlastnosti výsledných nanokompozitů a lze tak "ladit" jejich vlastnosti.

Budeme rozšiřovat skupinu fosfinátových MOFů, studovat možnosti jejich post syntetické modifikace a aplikační potenciál. Soustředíme na syntézu nových linkerů, například molekul, které ponese fosfinátové a zároveň fosfonátové skupiny a studium možnosti přípravy porézních struktur. Tyto struktury budeme porovnávat s čistě fosfinátovými a fosfonátovými strukturami. Budeme se snažit připravit MOFy, které obsahují kyselé skupiny uvnitř póru, tak aby umožňovaly separaci kovů nebo protonovou vodivost. Dále budeme rozvíjet studium stability MOFů ve vodných roztocích a pufrech nejen o další běžně používané MOFy, ale budeme také zkoumat možné mechanismy hydrolyzy MOFů a možnosti zpomalování těchto pochodů tak, aby se zvýšila aplikovatelnost MOFů ve vodných prostředích.

Budeme pokračovat ve studiu dielektrických, magnetických a magnetoelektrických vlastností hexagonálních feritů ve formě orientovaných keramik a vrstev, které mají potenciál dosažení magnetoelektrického (ME) a spinového Seebeckova (SSE) jevu při pokojové teplotě.

V rámci aplikačních aktivit bude pokračovat vývoj pokročilých anorganických materiálů pro potřeby jaderného průmyslu, zejména vývoj speciálních nízkoalkalických betonů pro potřeby jaderných úložišť a „obětních“ materiálů pro havarijní situace reaktorů vyšších generací. Dále bude pokračovat vývoj v oblasti systémů pro anorganický 3D tisk a budou ověřovány vysoce adhezní anorganické nátěry kovů pro vysokoteplotní aplikace.

V rámci výzkumu sorbentů radionuklidů a těžkých kovů bude výzkum rozšířen o kompozitní materiály na bázi  $\text{TiO}_2$  a ferrokyanidu. Pozornost bude zaměřena i na anorganické 2D materiály jako plniva či heterogenní katalyzátory pro přípravu polymerních materiálů. Spolupracujeme na vývoji plovoucích fotokatalyzátorů se synergickou adsorpční schopností.

Aktivita v oblasti základního výzkumu sloučenin boru bude nadále zaměřena na vývoj nových typů reakcí a (poly)substituci na strukturně odlišných borátových aniontech, heteroboránových a karboranových klastrech a pochopení její stereochemie a vnesených fyzikálně-chemických vlastností. Aktivita budou dále směřovány k pokračování ve vývoji (poly)substituovaných metallakarboranových sendvičových strukturních bloků, které lze využít jako stavební jednotky v nanochemii a farmakologii. Budou prováděny strukturní studie známých i nových typů látek založené na kvantově-chemických výpočtech a difrakčních metodách.

V oblasti fotoaktivních molekul a materiálů budeme pokračovat v designu, přípravě, charakterizaci a ladění jejich fyzikálně-chemických, fotofyzikálních a fotochemických vlastností.

Bude nadále probíhat studium fyzikálně chemických dějů, ke kterým dosází při tvorbě monomolekulárních vrstev substituovaných (kar)boranů na povrchu kovu. Bude především studována samoskladná tvorba vrstev u thiolových derivátů klastrových borátových aniontů.

V oblasti potenciálních aplikací boranových sloučenin bude pokračovat vývoj syntézy biologicky aktivních klastrových sloučenin a studium farmakologických vlastností s ohledem na jejich nadějný potenciál pro vývoj léčiv. Pozornost bude nadále zaměřena na studium využití nízkomolekulárních a derivátů (metala)karboranů pro transport léčiv přes gastrointestinální a hematoencefalickou bariéru. Bude nadále pokračovat vývoj kinásových a topoisomerásových inhibitorů a bude rozpracována syntéza nových typů klastrových antibiotik s účinností proti resistantním kmenům bakterií.

Bude probíhat systematická elektrochemická charakterizace substituovaných klastrových sloučenin boru a studium jejich biokonjugaci s většími molekulami s cílem jejich rychlé a snadné elektrochemické odezvy.

Nadále se budeme věnovat studiu polycyklických helicénových struktur, které obsahují křemík a bór.

V rámci studia kulturního dědictví bude pokračovat výzkum portrétních miniatur 17. až 19. století, malovaných na různých podložkách – slonovině, kovu, papíru, skle. Již zjištěné degradační procesy, které jsou v těchto malbách rozšířené více, než se původně předpokládalo, budou experimentálně ověřovány. Tento specifický úkol naváže na širší experimentální výzkum degradací barev, zaměřený především na procesy saponifikace. Při popisu iniciálních stádií procesu se výzkum zaměří na technologické vlivy (tloušťka vrstev, přítomnost ochranného laku a různých inhibitorů v barevné vrstvě, nebo charakter podložky), v další fázi pak pokročí ke studiu krystalizace kovových mýdel. Průběžně získávané výsledky výzkumu různých miniatur budou využity v provenienční analýze – budou shromážděny znaky umožňující rozdělení miniatur do různých výtvarných dílen a také rozlišení různých typů kopií a falz. Detailní pozornost bude věnována právě pigmentům regionálně či dílensky specifických – vedle pigmentů jílových nebo měďnatých, sledovaných dlouhodobě v širším historickém kontextu, to bude i nově objevený Cassiův purpur. Budou replikovány různé postupy jeho přípravy.

V oboru environmentální geochemie budou pokračovat výzkumné aktivity zaměřené na (1) pokročilé metody statistického zpracování geochemických dat a (2) současnou nebezpečnost ohnisek historického znečištění říčních niv, odkud se stále dostávají těžké kovy do potravního řetězce. Pozornost v tématu (2) bude věnována především znečištění rtuť na horní Ohři, kadmíem a olovem na Litavce a uranem na Ploučnici. V rámci tématu (1) by měly vznikat postupy, použitelné univerzálně v geochemii i v oblastech mimo dosavadní činnost LEGA.

## VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí:

Pracovníci ústavu se dlouhodobě podílejí na vývoji technologických procesů zaměřených na řešení problému nakládání s vysoce aktivním jaderným odpadem, který vzniká při zpracování vyhořelých jaderných paliv. Optimálním řešením se zdá přepracování paliva v uzavřeném cyklu, který by vedl k důsledné a rychlé eliminaci nejvíce radiotoxických štěpných produktů (minoritních aktinoidů, především Am), výrazně (až tisíckrát s ohledem na dobu nezbytného uložení a šedesátkrát z hlediska objemu) snížil objem radioaktivních odpadů ukládaných v povrchových i hlubinných úložištích. Od roku 2017 jsme členy konsorcia projektu GENIORS (EURATOM, Horizon 2020), jehož cílem je prohloubení znalosti o separaci minoritních aktinoidů za použití řady vybraných činidel, pochopení stability ligandů, komplexů a rozpouštědel přítomných v systému vůči ionizujícímu záření a hlediska spojená s vývojem procesu a jeho bezpečností. Úkolem našeho týmu je detailní analýza, izolace a charakterizace degradačních produktů, které vznikají působením ionizujícího záření na systémy založené na selektivních extrakčních činidlech pro minoritní aktinoidy, a to za použití chromatografických separačních metod kombinovaných s hmotnostní spektrometrií a metodami NMR spektroskopie.

Nadále se budeme zaměřovat na přípravu adsorbentů a fotokatalytických materiálů schopných odstraňovat nežádoucí a vysoce toxické látky z životního prostředí. Usilujeme o vývoj metod přípravy těchto materiálů, jež mají nižší dopad na životní prostředí a nízkou energetickou a materiálovou náročnost. Podařilo se nám tak vyvinout novou syntézu nanostrukturního  $\text{CeO}_2$ , kterou chceme dále připravovat nové nanokompozitní materiály. Dále pokračujeme v zavádění a vývoji technik (*operando* DRIFTS) pro sledování mechanismu rozkladných reakcí nejen v kapalné fázi, ale i na rozhraní plyn/pevná látka pro sledování rozkladu VOC a jiných plynných polutantů. Také rozšiřujeme okruh testovaných látek o nové emergentní polutanty (např. bisfenol-S, nové pesticidy objevující se ve vodách a zbytky léčiv), u kterých popojeme mechanismus jejich rozkladu.

Pokračujeme ve vývoji anorganických matic pro přípravu „obětních“ a nízkoalkalických materiálů. „Obětní“ materiály slouží k sanaci roztaveného jaderného paliva při havarijních situacích, nízkoalkalické betony by měly zvyšovat funkčnost jaderných úložišť, oba materiály jsou tak dalším potenciálním příspěvkem pro zvýšení bezpečnosti jaderné energetiky, zejména u reaktorů vyšších generací, jejichž vývoj probíhá i v ČR.

Po několika letech obecného nezájmu byl na základě iniciativy privátního investora obnoven vývoj zcela původních ekologických betonů připravených z odpadních surovin. Základním požadavkem investora jsou úspory emisí  $\text{CO}_2$  a ceny materiálů srovnatelné s cenami klasických betonů na bázi portlandských cementů. Ústav reflektuje i výhledové potřeby ČR k jejím závazkům při snižování emisí skleníkových plynů a intenzivně se věnuje vývoji nových systémů nahrazujících portlandské cementy. Výroba portlandských cementů patří ke třetím největším "producentům"  $\text{CO}_2$ . Námi vyvíjené nové ekologické betony budou využívat zejména odpadní suroviny nebo suroviny, které jsou energeticky méně náročné.

Podílíme se rovněž na dalším vývoji a optimalizaci vlastností kompozitního fotokatalytického materiálu na bázi  $\text{SiO}_2 - \text{TiO}_2$ , který pod názvem Balclean zařadila

do vyráběného sortimentu firma BARVY A LAKY TELURIA, s.r.o. Materiál je v současné době používán pro zamezení růstu řas a samočisticí úpravu povrchu zateplených panelových domů. Na toto úspěšné téma plynule navázal další projekt zabývající se fotoaktivními nanokompozitními systémy pro zlepšení životního prostředí se zaměřením na ošetření historických objektů, který je opět řešen ve spolupráci s firmou BARVY A LAKY TELURIA, s.r.o., dále s firmou PRAGOTHERM, servis fasád s.r.o. a několika dalšími vědeckými institucemi.

S ÚJV Řež, a.s. dlouhodobě spolupracujeme na vývoji sorbentů radionuklidů a těžkých kovů. Záměrem této spolupráce je dekontaminace vody po haváriích, rekultivace po těžební činnosti a využití těchto materiálů k monitorování kontaminantů.

V rámci spolupráce s Ústavem pro hydrodynamiku AV ČR, v. v. i. se zaměřujeme na některé aspekty úpravy pitné vody - odstranění Mn, mikroplastů a organických polutantů.

Zařízení na bázi materiálů vykazující spinový Seebeckův jev lze perspektivně použít ke konverzi tepelné energie, tj. ztrátového tepla jiným způsobem nevyužitelného, na elektrickou energii.

Budeme pokračovat ve studiu (*hotspots*) znečištění rtutí v nivě přítoků Ohře z Německa, kadmíem a olovem v nivě Litavky a uranem v nivě Ploučnice. Víme, jak vznik ohnisek znečištění vysvětlit pomocí geochemického mapování a využitím geografických informačních systémů a znalostí o vývoji říčních systémů (geomorfologie a sedimentologie). Monitorování historických zátěží se podle současné legislativy prakticky neprovádí nebo z nich nevznikají dohledatelné výstupy. Tuto špatnou situaci budeme nadále zlepšovat.

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

## IX. Aktivity v oblasti pracovněprávních vztahů: \*)

Základní personální údaje:

k 31. 12. 2020 bylo v ústavu zaměstnáno 82 fyzických osob (FO).

### Struktura zaměstnanců ústavu

Počet zaměstnanců (FTE)		celkem	z toho muži	z toho ženy
		70,9	38,9	32
v tom	pracovníci ve výzkumných týmech	54,8	35,6	19,2
	administrativní pracovníci	12	1	11
	techničtí a další pracovníci	4,1	2,3	1,8

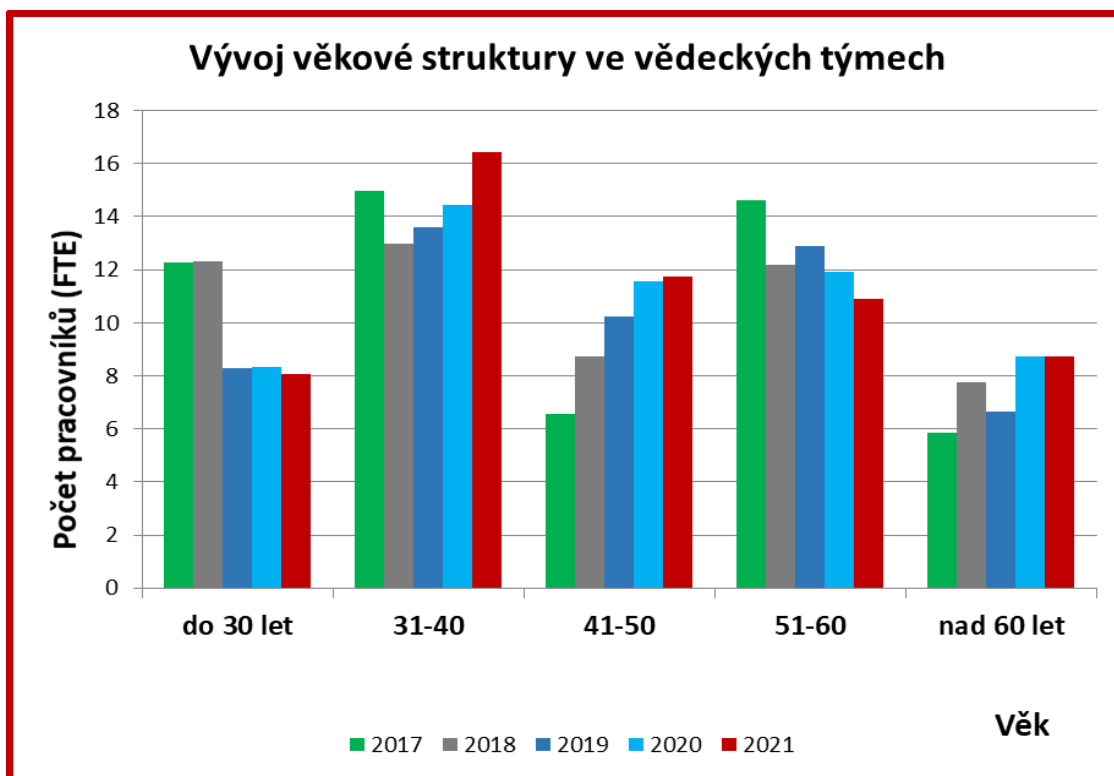
Z uvedené tabulky vyplývá, že cca 77 % pracovní kapacity zaměstnanců ústavu tvořili pracovníci ve výzkumných týmech. Z těchto pracovníků (FTE) mělo 96 % ukončené VŠ vzdělání a z nich bylo 70 % vědeckých pracovníků (získali Ph.D. titul nebo jeho ekvivalent) a 13 % studentů doktorského studia.

V roce 2020 pracovní poměr ukončili 2 pracovníci. Bylo přijato 6 pracovníků, kteří byli zařazeni do výzkumných týmů, z nich 4 postdoktorandi. Při přijímání nových pracovníků je kladen důraz především na odbornost, vědeckou úroveň a perspektivu pracovníka.

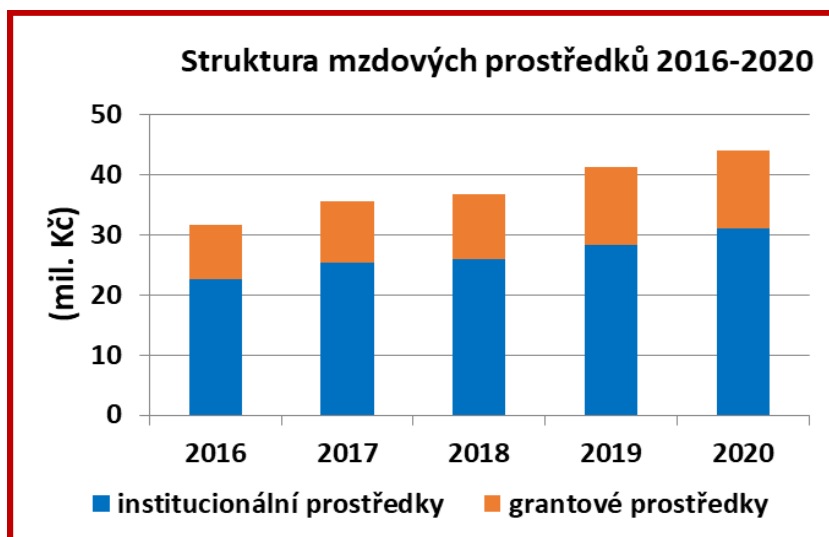
Vedení ústavu věnuje setrvalou pozornost studentům DSP i pregraduálním studentům, jejichž práce probíhá pod supervizí ústavních školitelů. Studenti spolupracují při řešení výzkumných projektů a aktivně se účastní prezentace výsledků včetně účasti na mezinárodních konferencích. Po úspěšné obhajobě diplomové práce nebo disertace mají ti nejschopnější možnost zahájit vlastní vědeckou kariéru na ústavu.

Věková struktura výzkumných pracovníků ústavu je příznivá. V následujícím obrázku je zobrazen vývoj věkové struktury výzkumných pracovníků v letech 2017 – 2020 s výhledem na r. 2021. Počet fyzických osob v nejnižší věkové kategorii je ve skutečnosti výrazně vyšší, protože významný podíl těchto pracovníků tvoří studenti pracující na částečný pracovní úvazek. Průměrný věk pracovníků ve vědeckých útvech zůstává ve srovnání s předchozím rokem přibližně stejný, 45 let.

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



Mzdové prostředky z dotace zřizovatele v r. 2020 činily cca 70 % z celkem vyplacených mzdových prostředků. Průměrná mzda ve výši 52 006 s meziročním nárůstem ve výši 2 % přesahuje celoakademický průměr o cca 6 000 Kč.



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

## X. Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb., o svobodném přístupu k informacím<sup>\*\*)</sup>



### Výroční zpráva o poskytování informací za rok 2020

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

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

1. Počet podaných žádostí o informace

**0**

2. Počet vydaných rozhodnutí o odmítnutí žádosti

**0**

3. Počet podaných odvolání proti rozhodnutí

**0**

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

**Nebyl vydán žádný rozsudek soudu.**

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

**Nebylo vedeno žádné sankční řízení**

<sup>\*\*)</sup> Údaje požadované dle §18 odst. 2 zákona č. 106/1999 Sb., o svobodném přístupu k informacím, ve znění pozdějších předpisů.



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

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

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

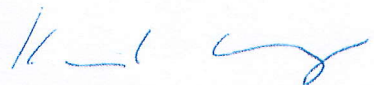
**Nebyla podána žádná stížnost.**

8. Další informace vztahující se k uplatňování tohoto zákona

0

Výroční zpráva ÚACH AV ČR, v. v. i., o poskytování informací podle zákona, bude začleněna do Výroční zprávy o činnosti a hospodaření ÚACH AV ČR, v. v. i., za rok 2020 jako její samostatná část s názvem „Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb., o svobodném přístupu k informacím“.

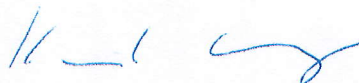
15. ledna 2021



Ing. Kamil Lang, CSc., DSc.  
ředitel ústavu

razítko

ÚSTAV ANORGANICKÉ CHEMIE AV ČR, v.v.i.  
250 68 Husinec-Řež, č.p. 1001  
IČO: 61388980, DIČ: CZ61388980  
-2-



podpis ředitele pracoviště AV ČR

Přílohou výroční zprávy je účetní závěrka a zpráva o jejím auditu