

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

IČ: 61388980

Sídlo: Husinec-Řež

Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2021

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 26.5. 2022

Radou pracoviště schválena dne: 14.6. 2022

V Husinci-Řeži dne 31.3. 2022

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 Ecordchard, 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. Dr. Ing. David Sedmidubský, 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.** (do 19.1. 2021)

RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc., AR AV ČR (od 20.1. 2021)

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:

19. 1. 2021 skončilo funkční období předsedy dozorčí rady Ing. K. Aima, CSc., pro další funkční období byl předsedou dozorčí rady jmenován RNDr. Z. Havlas, DrSc.

c) Informace o činnosti orgánů:

Ředitel:

V r. 2021 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. 2022,
- 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 květnu 2021 proběhla druhá fáze periodického hodnocení výzkumných týmů a pracovišť Akademie věd. Závěrečné jednání bylo vedeno on-line a kromě ředitele ústavu se ho účastnili i vedoucí hodnocených týmů.

V průběhu r. 2021 bylo vydáno osm interních předpisů (IP): IP č. 108 – Využití prostředků Sociálního fondu, IP č. 109 – Evidence majetku, IP č. 110 – Vyřazování a likvidace movitého majetku, IP č. 111 – Nakládání s duševním vlastnictvím se zaměřením na autorská zaměstnanecká díla, IP č. 112 – Nakládání s duševním vlastnictvím se zaměřením na výsledky chráněné průmyslovými právy, IP č. 113 – Jednací řád Rady ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i., IP č. 114 – Zajištění bezpečnosti a ochrany zdraví při práci a IP č. 115 – O uchovávání bezpečnostních listů a návodů na bezpečnou obsluhu zařízení a seznámení se s jejich obsahem. Byly vydány Příkaz ředitele k odstranění nedostatků vyplývajících z kontroly hospodaření a Příkaz ředitele k provedení inventarizace hospodářských prostředků v r. 2021. Dále byly vydány tři směrnice s názvy Směrnice ředitele pro účely poskytování cestovních náhrad v roce 2021 a její Dodatek č. 1, Směrnice ředitele o poskytování peněžitého příspěvku na stravování zaměstnanců a Metodika vykazování skutečných nepřímých nákladů projektů výzkumu a vývoje v r. 2021.

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. 2022.

Přístrojové vybavení ústavu bylo v r. 2021 doplněno o rentgenový práškový difraktometr, luminiscenční spektrometr pro měření při nízkých teplotách a automatický flash chromatografický systém. 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. 2021 bylo řešeno 29 projektů VaV v programech GA ČR (15), TA ČR (6), MŠMT (5), MK (1) a Horizont 2020 (2). Účelové prostředky plynoucí z podpory zmíněných poskytovatelů do rozpočtu představovaly cca 38 % neinvestičních nákladů ústavu. Mzdové prostředky vyplacené z účelových dotací činily cca 29 %.

Rada pracoviště:

V r. 2021 se uskutečnilo 9 jednání Rady ÚACH AV ČR v. v. i.:

108. jednání, 25. – 31. 1. 2021, *per rollam*

- Rada projednala a schválila IP č. 108 – Využití prostředků Sociálního fondu.

109. jednání, 27. – 31. 3. 2021, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu *Mechanochromic polymer-based hybrid materials as a facile colorimetric sensor for amyloid beta detection* K. Langa do programu Visegrad Group (V4) - Japan Joint Research Program on Advanced Materials, MŠMT.

110. jednání, 13. – 16. 4. 2021, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila k podání návrhy přihlášek do grantové soutěže GA ČR 2022, v nichž pracovníci ústavu figurují jako navrhovatelé či spolunavrhovatelé.

111. jednání, 26. 4. 2021, *on-line*

- Rada se zabývala sporem D. Hnyka a O. L. Toka o autorství práce. Rada shledala, že uvnitř autorského týmu došlo k řadě komunikačních chyb, zároveň ale konstatovala, že nedošlo k porušení pravidel etiky vědecké práce ze strany korespondujícího autora D. Hnyka.

112. jednání, 7. - 11. 5. 2021, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhu M. Motlochové do grantové soutěže TAČR Théta 4.

113. jednání, 26. 5. 2021, *on-line*

- Ředitel ústavu K. Lang informoval Radu o probíhajícím periodickém hodnocení výzkumných týmů a pracovišť AV ČR. Rada vzala informace na vědomí bez připomínek.

114. jednání, 9. 6. 2021

- Rada projednala a schválila Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ústavu za r. 2020, seznámila se se zprávou auditora o ověření účetní závěrky za r. 2020, projednala a schválila rozpočet výnosů a nákladů na r. 2021 a střednědobý výhled 2022–2023. Rada dále schválila přesun hospodářského výsledku za r. 2020 do Fondu reprodukce majetku a do Rezervního fondu.

- Rada projednala a schválila zrušení IP č. 53 a IP č. 62 a vydání IP č. 111 - *Nakládání s duševním vlastnictvím se zaměřením na autorská zaměstnanecká díla* a IP č. 113 *Jednací řád Rady Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i.*

115. jednání, 6. – 9. 9. 2021, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila k podání návrh na zařazení J. Hynka do Programu podpory perspektivních lidských zdrojů AV ČR.

116. jednání, 23. – 26. 11. 2021, *per rollam*

- Rada projednala žádosti Z. Čermákové, P. Jánošíkové a E. Pližingrové o udělení výjimky z Volebního řádu Rady ústavu (IP č. 107, článek 1 a 2), týkající se minimálního pracovního úvazku opravňujícího k účasti na volbě Rady ústavu. Výjimky byly uděleny.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu E. Pližingrové do grantové soutěže MŠMT.

Dozorčí rada:

V r. 2021 se uskutečnila 4 jednání Dozorčí rady ÚACH AV ČR v. v. i.

Per rollam 1/2021; usnesení bylo schváleno 25. 1. 2021

- Dozorčí rada vydala předchozí písemný souhlas k uzavření smlouvy na dodávku rentgenového práškového difraktometru s Co rentgenkou mezi ÚACH a dodavatelem Malvern PANanalytical B.V.

20. jednání (kombinované prezenční a distanční), 1.6. 2021

Dozorčí rada

- vyslovila souhlas s Výroční zprávou o činnosti a hospodaření ÚACH AV ČR, v. v. i. v r. 2020,
- vzala na vědomí zprávu nezávislého auditora o ověření účetní závěrky za r. 2020,
- vyslovila souhlas s návrhem rozpočtu nákladů a výnosů na rok 2021 a vzala na vědomí výhled rozpočtu do r. 2023,
- určila firmu Efekt DC, s.r.o. (IČO 62243292) auditorem na rok 2021,
- zhodnotila manažerské schopnosti ředitele ÚACH Ing. Kamila Langa, CSc., DSc.

Per rollam 2/2021; usnesení bylo schváleno 23. 6. 2021

- Dozorčí rada schválila Zprávu o činnosti Dozorčí rady ÚACH za r. 2020.

21. jednání (distanční), 6.12. 2021

Dozorčí rada

- vyslechla zprávu ředitele o hospodaření ústavu v r. 2021, o rozpočtovém výhledu na r. 2022 a o úspěšnosti v získávání grantových projektů GA ČR,
- byl diskutován odraz evaluace ústavu v r. 2021 ve finanční podpoře ústavu.

II. Informace o změnách zřizovací listiny:

V r. 2021 nedošlo ke změně zřizovací listiny.

III. Hodnocení hlavní činnosti:

1. Vědecká činnost ústavu a uplatnění jejích výsledků

1a) Stručná charakteristika vědecké činnosti

V roce 2021 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 a fotosensitizačními vlastnosti. Hlavní důraz je kladen na jejich chemickou stabilitu, fotostabilitu, vysoké luminiscenční kvantové výtěžky, nízkou toxicitu, fototoxicitu a biokompatibilitu s ohledem na jejich využití pro stabilní luminiscenční (nano)materiály v materiálové chemii a aktivní komponenty pro teranostiku v biologii.

Zejména studujeme následující 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 nebo jejich konjugátů s organizovanou strukturou. Jedná se o mikrokrystalické materiály, 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.
- Luminiscenční molekuly skládající se z boranových klastrů, které mají vysoké luminiscenční kvantové výtěžky a stabilní laserovou emisi jako alternativa v současných laserových zařízeních. Proto se zaměřujeme na přípravu nových klastrů a popis jejich fotofyzikálních vlastností v součinnosti s využitím predikčního potenciálu kvantově chemických výpočetních metod, a dále tenkých filmů luminiscenčních boranů v polymerních maticích pro luminiscenční solární koncentrátoři.
- Skupinu kationtových sloučenin boru, tzv. boranyliových solí. Díky pozitivnímu náboji lokalizovanému na atomu boru mají uvedené sloučeniny lewisovsky kyselý charakter, což je v kombinaci s jejich luminiscenčními vlastnostmi činí atraktivními pro přípravu selektivních fotochemických senzorů.

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 metallakarboranů orientovaná na design nových biologicky aktivních sloučenin a materiálů.
- Biologicky aktivní borany jako selektivní inhibitory pro protinádorovou terapii; optimalizace struktur inhibitorů enzymu CA-IX; syntéza nových typů sloučenin navržených jako inhibitory kináz; příprava nových typů látek derivátů metallakarboranů, které jsou schopny zvýšit účinek cis-platiny v protinádorové léčbě.
- Knihovna nově připravených sloučenin pro stanovení faktorů, které jsou zodpovědné za přestup přes gastrointestinální a hematoencefalickou bariéru a knihovna nízkomolekulárních látek s bis(dichlorethyl)aminovou skupinou a fluorescenčně značených látek pro sledování cytotoxicity.
- Příprava nových typů sloučenin vhodných pro elektrochemické značení DNA a peptidů a optimalizace reakčních kroků pro snadné propojení molekul.
- Boranové nebo karboranové klastry jako dvourozměrné struktury samoorganizované na povrchích s využitím při ochranu 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 bor, křemík, germanium, cín, kyslík, síru a dusík v různých kombinacích s potenciálním využitím v molekulární elektronice.

Nové materiály pro udržitelné životní prostředí

Zaměřujeme se na vývoj nových materiálů pro environmentální aplikace, např. pro čištění kontaminovaného vzduchu, povrchových vod a půdy, katalýzu nebo materiály snižující energetickou náročnost. Jedná se hlavně o tyto materiály:

- Nanokompozitní materiály na bázi TiO_2 s nízkodimenzionálními komponentami (uhlíkové nanostruktury, 2D nanomateriály), které zvyšují fotokatalytickou a adsorpční účinnost nebo přidávají nové funkce výslednému kompozitu. Na těchto materiálech studujeme účinnost adsorpce a rozkladu polutantů vod (pesticidy, zbytky léčiv, endokrinní disruptory) a ovzduší (zejména VOC, organofosforečné látky).
- Vývoj pokročilých nanomateriálů na bázi plasmonových nanočástic (Au, Ag, Cu) s fotonickými TiO_2 nanovrstvami pro HER štěpení vody a eliminace bakteriálních populací (*E. coli*).
- Nanostrukturní materiály na bázi oxidu ceričitého CeO_2 , který váže a rozkládá organofosforečné pesticidy nebo nervově paralytické bojové chemické látky (typu Sarin, Soman, látka VX), endokrinní disruptory a zbytky léčiv. Studujeme jeho tzv. pseudo-enzymatickou aktivitu a schopnost štěpit fosfodiesterové vazby pro

biomedicínské aplikace. Vyvíjíme nové metody přípravy fotoaktivních forem CeO_2 i ve velkém měřítku (stovky gramů a více). Velikostí jeho částic, strukturou defektů i povrchovým chemickým složením řídíme jejich degradační aktivitu ve výše zmíněných reakcích.

- Porézní koordinační polymery (metal-organické sítě – MOF): jejich stabilita ve vodném prostředí a vývoj nových MOFů založených na ligandech nesoucích fosfinátové koordinační skupiny. Kromě laditelné funkcionality tyto materiály vykazují vysokou stabilitu ve vodném prostředí. Jsou testovány jako sorbenty emergentních polutantů a jako materiály s protonovou vodivostí. U vybraných strukturních modelů pak také testujeme jejich možné použití jako polovodičů.
- Aktivní Borany – nový typ mikroporézních materiálů vyvinutý na ÚACH, mající strukturu založenou na kombinaci boranových klastrů s organickými můstky, které jsou spojené pomocí B-C a B-B vazeb. Studujeme mechanismus vzniku, variabilitu této skupiny porézních polymerů a aplikace jako je sorpce emergentních polutantů, nebo použití jako heterogenního katalyzátoru.
- Multiferroické a termoelektrické materiály na bázi oxidů Fe(III) ve formě orientovaných tenkých vrstev a keramik.
- Vývoj sorbentů na bázi kyseliny metatitaničité modifikované i grafen oxidem je zaměřen na sorpci radionuklidů, těžkých kovů nebo selenu. Tento typ sorbentu se zároveň testuje 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 vůči Ne^+/He^+ bombardování.

Ochrana kulturního dědictví

Příspěvkem ke snaze o zachování kulturního dědictví je interdisciplinární výzkum výtvarného umění využívající poznatků moderní anorganické a analytické chemie. Tento výzkum má silný aplikační potenciál v oblasti provenienční analýzy výtvarných děl, kde může zpřesnit dataci, regionální nebo autorské určení díla, a to na základě pokročilé neinvazivní a nedestruktivní mikroanalýzy použitých malířských materiálů a technologií. Druhým směrem je pak dlouhodobý experimentální výzkum se zaměřením na odhalení příčin a mechanismů degradací barev projevující se například změnami barevnosti nebo ztrátou koheze vrstev. To pak vedle zhodnocení díla vede i k návrhu jeho další preventivní ochrany či restaurování.

Příkladem provenienční analýzy je probíhající rozsáhlý výzkum miniaturních portrétů 17. – 19. století z českých sbírek s využitím nejmodernější analytické techniky. Tato drobná dílka dosud nebyla vědecky zkoumána – především kvůli choulostivosti a křehkosti podložky (většinou slonovinové) 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, které vedly

k rozlišení nejrůznějších kopií a falz, přemaleb, retuší nebo doplněných signatur. Příkladem experimentálního výzkumu degradací je dnes velmi aktuální studium tvorby kovových mýdel v malířských vrstvách, které je nahlíženo z mnoha úhlů – jsou studována iniciální stádia a vnější faktory urychlující vznik karboxylátů nebo jsou nově popisovány jejich krystalové struktury. Od jednoduchých modelových experimentů se postupuje ke studiu komplikovanějších systémů imitujících procesy v reálných dílech.

Geochemická analýza sedimentů, půd a rostlinného materiálu

Laboratoř je zaměřená na analýzu složení říčních, nivních a přehradních sedimentů a půd. Pokud je cílem rekonstrukce paleoprostředí, jde o interdisciplinární vědu kombinující poznatky a metody chemické analýzy, anorganické chemie, geomorfologie a geologie. Zvláštní pozornost byla věnována znečištění sedimentů a půd rizikovými prvky a zpracování geochemických dat pro odlišení vlivu geologického původu. Analyzovány byly obsahy rizikových prvků v listech rostlin, především dřevin, rostoucích na kontaminovaných půdách. Výzkum byl zaměřen na tyto oblasti:

- Posouzení vlivu člověka na složení sedimentů pro odlišení vlivů přírodních (původ, velikost částic, způsoby transportu sedimentů).
- Hledání diagnostických znaků geologického původu půd v oblasti SZ Čech.
- Pokročilá statistická analýza geochemických dat logpodílovými a robustními statistikami.
- Poznání mechanismů přenosu rizikových prvků do listů rostlin a rizik vzhledem ke vstupům prvků do potravního řetězce.

Aplikovaný výzkum

Ve spolupráci s průmyslovými partnery probíhá materiálový výzkum a vývoj s reálným aplikačním potenciálem:

- Fotokatalytické $\text{SiO}_2\text{--TiO}_2$ kompozity a modifikované nanosoly ZnO se samočisticími vlastnostmi pro sanace povrchů budov a soch kontaminovaných řasami nebo plísněmi.
- Ekologické prostředky pro sanace zateplených fasád.
- Konstrukční a speciální betony včetně funkčních materiálů na bázi původních anorganických matic určených pro jaderný průmysl.
- Ekologické pojivové systémy na bázi odpadních materiálů jako budoucí náhrada portlandských cementů.
- Anorganické nátěrové systémy pro nové technologie a pro sanace betonů v jaderném průmyslu.
- Anorganické systémy pro technologii suspenzního i reakčního 3D tisku.
- Kompozitní (nano)materiály s vysokou sorpční schopností pro radionuklidy a těžké kovy.
- Plovoucí kompozitní fotokatalyzátor pro čištění kontaminovaných přírodních vodních zdrojů.

1b) Výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti a jejich aplikací

Nejvýznamnější výsledky byly v r. 2021 získány především v oblastech materiálové chemie a chemie boranových sloučenin:

V oblasti fotoaktivních anorganických molekul a (nano)materiálů jsme pokračovali v přípravě, charakterizaci a ladění jejich fyzikálně chemických, fotofyzikálních, fotochemických a fotobiologických vlastností. Připravili jsme nové oktaedrické klastrové komplexy molybdenu (Mo_6) a specifikovali jejich optimální složení pro biologické aplikace. Tyto komplexy (biomateriály) jsou luminiscenční a po ozáření viditelným světlem produkují vysoké výtěžky singletového kyslíku. Mnohé z těchto komplexů byly silně fototoxické a byly úspěšně testovány pro fotodynamickou terapii rakovinových buněk (PDT) a fotodynamickou terapii indukovanou rentgenovým zářením (X-PDT). Popsali jsme radiotoxické efekty Mo_6 komplexů a některé z těchto komplexů jsme testovali na myších modelech ve spolupráci s biologickými pracovišti.

Popsali jsme povrchy s antimikrobiálními a antivirovými vlastnostmi. Těchto vlastností jsme dosáhli speciálním designem povrchů polymerních fólií a nanovláken. Jednalo se o dva rozdílné přístupy: (i) postupné uvolňování jódu, (ii) vznik cytotoxického singletového kyslíku po ozáření zabudovaných molekul na povrchu materiálů.

Spojením dvou oxidických materiálů TiO_2 a CeO_2 jsme připravili multifunkční nanomateriály pro rozklad vysoce toxických sloučenin, jako jsou organofosforečné pesticidy a nervově paralytické bojové látky (např. toxický plyn Sarin). Kombinací vlastností obou nanomateriálů, tj. vysoké povrchové reaktivity CeO_2 a vysoké fotoaktivity TiO_2 , jsme docílili vysokých aktivit při rozkladu těchto toxikantů několika mechanismy, a tudíž rozklad probíhá rychleji, než na jednosložkových materiálech.

Oxid CeO_2 je reaktivním sorbentem pro různé druhy polutantů (organofosforečné látky, bisfenoly, vybraná rezidua léčiv), a proto jsme vyvinuli nenáročné metody jeho přípravy. Jedna z připravených nanoforem CeO_2 má výrazné fotokatalytické vlastnosti díky defektní struktuře a povrchové chemii. Předběžné výsledky získané ve spolupráci s Wroclaw University of Environmental and Life Sciences také ukázaly výrazné antivirotické vlastnosti některých forem CeO_2 , a přitom jejich velmi nízkou cytotoxicitu. Předmětem studia bylo objasnění vztahu mezi defektní strukturou a povrchovou chemií CeO_2 a adsorpčními, degradačními, antivirotickými (případně antibakteriálními) vlastnostmi.

Skupinu ICR (Inorganic Chemistry Řež) MOFů jsme rozšířili o další dvě struktury. Zatímco všechny předešlé ICR MOFy obsahují hydrofobní póry, tyto nově připravené materiály jsou hydrofilní, čehož jsme s úspěchem využili k vývoji materiálů s protonovou vodivostí. Také jsme úspěšně popsali stabilitu Zr-MOFů ve vodných prostředích, což je důležitý předstupeň pro jejich aplikace.

Připravili jsme první porézní koordinační polymer založený na boranových klastrech spojených přímo pomocí C-B vazeb pomocí tolylových jednotek. Polymer vzniká za vysoké teploty z komerčně dostupných chemikálií (dekaboran(14) a toluen). Tento nový porézní polymer jsme pojmenovali *Aktivní boran*. Dále jsme prokázali, že *Aktivní boran* je velmi dobrým sorbentem emergentních polutantů, jehož maximální sorpční kapacita je až o 50 % vyšší, než je sorpční kapacita používaného aktivního uhlí.

V rámci mezinárodní spolupráce jsme připravili a charakterizovali tenké vrstvy hexagonálních ferritů s multiferroickými vlastnostmi. Dosáhli jsme až 15x vyšších hodnot magnetoelektrické susceptibility v porovnání s monokrystaly téhož složení. Výsledky byly publikovány.

Byly prostudovány faktory, které mají vliv na fotostabilitu makropolyhedrálních modře emitujících laserových barviv v prostředí polymerní matrice. Fotofyzikální vlastnosti byly vysvětleny na základě měření fotoluminiscence a NMR spektroskopie a s ohledem na interakce, ke kterým dochází v prostředí polymer-rozpouštědlo.

Byla prostudována ligandy řízená konverse karboranovým dithiolem chráněného menšího nanoklastru o 18 atomech Ag na dosud největší známý útvar modifikovaný karboranem o 42 atomech stříbra. Byl prostudován mechanismus světlem indukované konverse tohoto klastru na konečný produkt se 14 atomy Ag, který probíhá přes řadu meziproductů o střední velikosti. Na základě spektroskopických a teoretických metod byla studována fosforescence, luminiscence a tranzitní excitované stavy.

Byl prostudován nový typ reakcí 10-ti vrcholového *closo*-karboranového systému s N-heterocyklickými karbeny. Reakce vedly k řadě kationtových derivátů karboranů s otevřeným či uzavřeným skeletem. Kladně nabitě deriváty boranů a karboranů patřily doposud v chemii boru k téměř neznámé skupině látek. Tato inovativní syntetická metoda tak otevírá široké možnosti pro nové typy aplikací.

Byly detailně zpracovány a vyhodnoceny chemické, strukturní a fyzikálně-chemické faktory, které jsou zodpovědné za specifický účinek nekonvenčních klastrových inhibitorů enzymu lidská karbonická anhydráza IX.

Byly vypracovány postupy pro substituci metalla bis(dikarbollidů), které umožnily vnesení klastrových iontů s různými centrálními kovy do organicko-anorganických konjugátů s adenosinem. Výsledné sloučeniny výrazně zvyšují cytostatický účinek *cis*-platiny a karboplatiny na nádorové buněčné linie a mají relevanci pro léčbu nádorů vaječníků, vč. těch, které jsou resistantní vůči chemoterapii platinovými komplexy.

Ve spolupráci s BFÚ AV ČR byla prostudována elektrochemická odezva široké palety strukturně odlišných metallakarboranů a jejich derivátů s ohledem na jejich využití pro laditelné elektrochemické značení biomolekul. Byly vyvinuty podmínky pro 3+2 cykloadiční reakce, které umožnily snadné propojení metallakarboranových strukturních bloků s optimalizovanou elektrochemickou odezvou s modelovými organickými sloučeninami.

Byla nalezena jednoduchá reakční cesta k 4-boryl-2,5-dihydrosilolovým kruhům, která probíhá přes dvojnásobnou hydroboraci bis(alkynyl)silanu s následnou methanolýzou. Podobně reakce of diboryl-substituovaných di- and trisilolů poskytuje po methanolýze polycyklické 4-(9-BBN)-oligosiloly s dvojnou vazbou mezi atomy uhlíku. Mechanismus reakcí byl vysvětlen na základě NMR spektroskopie a teoretických výpočtů.

V oblasti geochemické analýzy sedimentů, půd a rostlinného materiálu byly publikovány výsledky využití nových statistických nástrojů (logpodílové a robustní metodiky) k hodnocení geochemických kompozičních dat říčních (Odra, Jizera) a přehradních sedimentů (Skalka). Cílem bylo odlišit vliv matrice (litologie) sedimentu od geochemického signálu znečištění. Tyto nové metody již nalézají odezvu ve vědecké komunitě a měly by nahradit dlouhá desetiletí používané, ale nevhodné

nástroje. Byly použity rovněž při analýze sedimentů mostecké pánve z období třetihor (miocénu), kde bylo nutné rozlišovat geochemické signály matrice sedimentu a intenzity chemického zvětrávání jako odrazu tehdejšího klimatu.

Byly publikovány výsledky rekonstrukce vývoje nivy řeky Ohře v posledních tisíciletích, ve které byly kombinovány mezioborové přístupy geochemie, sedimentologie a geomorfologie. Významným zjištěním bylo, že vstup rizikových prvků, hlavně Cd a Zn, do listů vrb rostoucích v kontaminovaných nivách (Litavka, Ploučnice) představuje významný vektor druhotného znečištění, tj. mobilizace kontaminace z nivních sedimentů do bioty.

V rámci výzkumu miniaturních portrétů 17.–19. století se podařilo nalézt způsoby neinvazivního rozlišování a popisu kopií a falz, které v 2. polovině 19. století souvisely zejména s rozvojem fotografických a fotolitografických přenosů. Byly popsány nejrůznější techniky replikování a nápodob klasické malované miniatury. Aplikovanými výstupy byly metodiky zaměřené na jednotlivé analytické nástroje a také výstavní projekt v prostorách Akademie věd ČR určený mezioborovému publiku i veřejnosti. Pokračoval i výzkum regionálně či dílensky specifických pigmentů, což v případě miniatur jsou například směsné olovnaté žlutě nebo vzácný Cassiův purpur tvořený nanočásticemi zlata. Byla replikována jeho výroba a studován vztah barvy, velikosti nanočástic a poměru vstupních reagentů. Pokročil i experimentální výzkum procesů saponifikace – inspirován reálnými systémy (včetně miniaturních maleb) byl zaměřen například na směsi olovnatých a rtuťnatých pigmentů, a to jak s ohledem na inhibiční/akcelerační funkci Hg v různých koncentracích při vzniku běžných Pb karboxylátů, tak i s ohledem na možnou tvorbu Hg karboxylátů, které dosud nebyly v reálných systémech spolehlivě popsány.

V rámci aplikačních aktivit:

- Pokračoval vývoj pokročilých anorganických materiálů pro jaderný průmysl: (i) na ochranu složení „obětních“ materiálů pro havarijní situace reaktorů byla podána přihláška užitého vzoru; (ii) upřesnili jsme složení vyšší generace speciálních nízkoalkalických betonů pro jaderná uložení.
- Sestavili jsme původní zařízení pro reakční anorganický 3D tisk a zjistili reprodukovatelnost procesu. Také jsme navrhli a vyzkoušeli systémy pro anorganický suspenzní 3D tisk.
- Vyvinuli jsme anorganické nátěry pro řízení tribologických vlastností kovů při vysokoteplotních aplikacích.
- Podařilo se vyvinout vysoce efektivní iontoměniče tyčinkovité morfologie na bázi Li, Na a K titanátů na odstranění Pb, Cd, Cu a Mn z vodného prostředí. Aminy srážené lístečkové TiO_2 byly využity jako fotokatalyzátory pro odstranění organických nečistot ve vodách ve Vietnamu. Byly vyvinuty povrchově a objemově kovy dopované fotokatalyzátory.
- Pomocí iontového bombardování MAX matrice se podařilo připravit tenký nanolaminát i-MXen, který prokázal velmi vysokou odolností vůči destruktivním procesům He^+ , Ne^+ a Ar^+ ozáření.
- Kryo-lyofilizační technikou připravené Cu-modifikované 1DTiO_2 mikrotyčinky a Ag-modifikované 2DTiO_2 nanolístičky splnily požadavky na fotoelektrodové PEC materiály a aktivně štěpily H_2O . Byla vyvinuta CPE elektroda na detekci

uranu ve vodném prostředí a byla podána patentová přihláška na její ochranu.

- Dvě ověřené technologie byly vyvinuty pro účinný, zcela jednoduchý a ekologický způsob ochrany zateplených fasád a pro památkově chráněné objekty před jejich napadením řasami a plísněmi. Probíhá implementace pro transparentní nátěr s planárním UV-stabilizátorem (funkční vzorek a ověřená technologie) ve spolupráci s firmou Prefa kompozity, a.s.

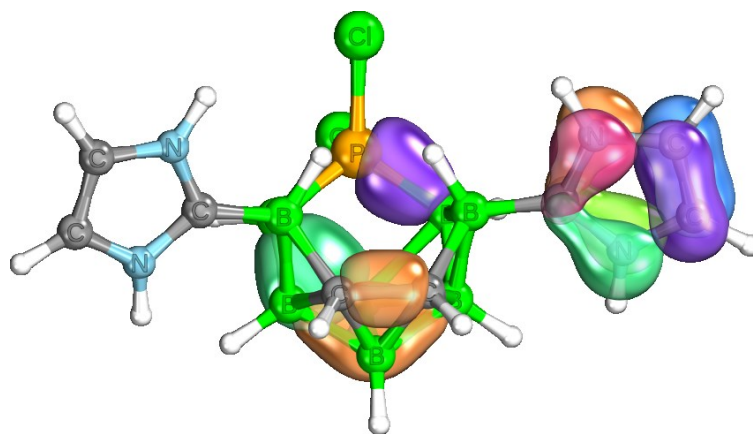
Získané výsledky byly v roce 2021 zveřejněny v 67 publikacích v mezinárodních časopisech, z toho významný podíl v časopisech, jejichž kvalita odpovídá prvnímu decilu D1 (9 článků) a prvnímu kvartilu Q1 (23 článků) v oboru (dle JCR). Na následujícím obrázku je znázorněn vývoj počtu publikací pracovníků ústavu v období 2017–2021.



Významné výsledky s uvedením citací:

(1) Odras nových sousedských vztahů boru a uhlíku v léčbě nádorů

Pomocí klastrové reorganizace N-heterocyklickými karborany byla připravena a charakterizována nová série kationtových polyhedrálních karboranů, které byly doposud známé jako záporně nabitě či neutrální sloučeniny s mnoha možnými aplikacemi. Výsledky se týkají přípravy a strukturní charakterizace prvních karboranových kationtů, které jsou velmi stabilní a rozpustné ve vodě, což tvoří opak oproti doposud známým neutrálním a aniontovým karboranům. Tyto kationty mohou být využity tam, kde je jejich přenos do okolí snadnější než v případě neutrálních a aniontových sloučenin, což se děje v případě protonové borové záchytové terapie, která vyžaduje přítomnost izotopu ^{11}B v rakovinných buňkách. Kationty lze využít i v chemii materiálů.



Kladně nabitý karboran

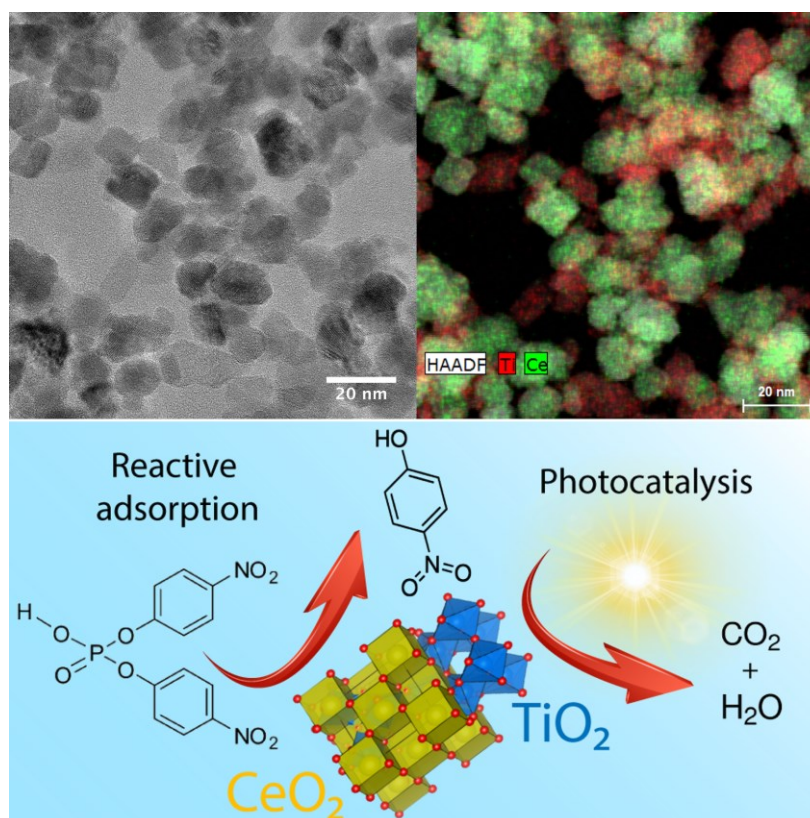
Prostorové uspořádání v jedné z nově připravených sloučenin.

Vrána, J., Holub, J., Samsonov, M.A., Růžičková, Z., Cvačka, J., McKee, M. L., Fanfrlík, J., Hnyk, D., Růžička, A.: Access to cationic polyhedral carboranes via dynamic cage surgery with N-heterocyclic carbenes. *Nature Communications*, **2021**, 12, Article No. 4971. JCR/D1

Spolupracující subjekty: Univ. Pardubice; Univ. Auburn, Auburn, USA; UOCHB AV ČR

(2) Multifunkční nanočástice schopné zachytávat a rozkládat toxické pesticidy i bojové chemické látky

Spojením dvou oxidických materiálů TiO_2 a CeO_2 v nanoměřítku se nám podařilo připravit multifunkční materiál, který rozkládá vysoce toxické sloučeniny, nebezpečné pro člověka i životní prostředí. Jedná se o pesticidy a nervově paralytické bojové látky, mezi které patří například toxický plyn Sarin. Kombinací vlastností obou nanomateriálů jsme docílili vysoké účinnosti rozkladu těchto toxikantů vícero mechanismy, a tudíž mnohem rychleji, než probíhá na jednosložkových materiálech.



Multifunkční nanočástice $\text{TiO}_2/\text{CeO}_2$ rozkládající toxické látky

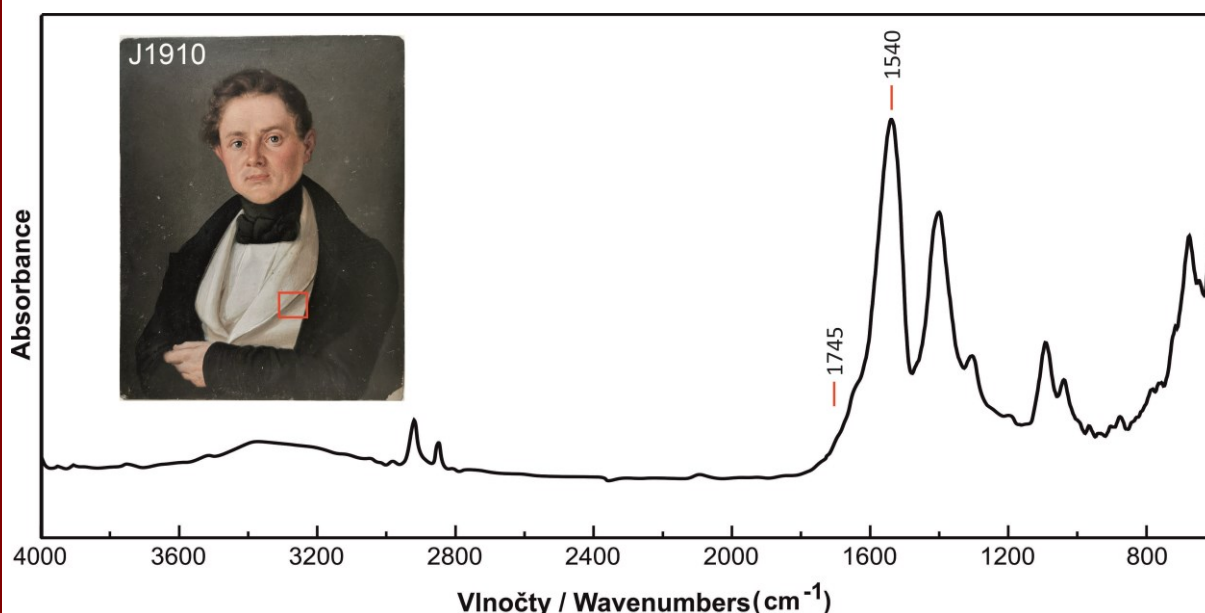
Snímky multifunkčních nanočástic $\text{TiO}_2/\text{CeO}_2$ pořízené elektronovým mikroskopem (horní část); schéma dvoustupňové rozkladné reakce na aktivních místech (pomocí tzv. reaktivní adsorpce) dále akcelerované světlem, tzv. fotokatalytický rozklad (spodní část).

Henych, J.*, Štastný, M., Němcová, Z., Mazanec, K., Tolasz, J., Kormunda, M., Ederer, J., Janoš, P.: Bifunctional $\text{TiO}_2/\text{CeO}_2$ reactive adsorbent/photocatalyst for degradation of bis-p-nitrophenyl phosphate and CWAs. *Chemical Engineering Journal* **2021**, 414, Article no. 128822

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

(3) Původ a degradace portrétních miniatur

S využitím špičkové analytické a zobrazovací techniky byly studovány portrétní miniatury 18. a 19. století, a to zcela neinvazivně. Poprvé byl v malbě miniatur popsán vznik kovových mýdel jako nežádoucí degradační proces. Nález kolodiových emulzí pod vrstvou malby zase pomohl odlišit fotografické přenosy od originálních malovaných miniatur. Tato zjištění jsou klíčová pro kategorizaci sbírek, odlišení kopií a falz, a pro formulaci správných postupů péče o miniatury obecně.



Měření miniaturního portrétu přenosným FT-IR spektrometrem

Degradace oleje (charakteristický pás v FT-IR spektru při 1745 cm^{-1} téměř nepatrný) a interakce s olovnatou bělobou v bílé malbě za vzniku olovnatých karboxylátů – mýdel (výrazný pás při 1540 cm^{-1}) / malba na kovové podložce, kolem 1840, $8 \times 10,3\text{ cm}$.

Garrapa, 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* **2021**, 413, 263-278. JCR/Q2

Spolupracující subjekt: 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. 2021 podíleli na zajištění přednášek, seminářů a vedení prací v pregraduálních programech Chemie (PřF UK v Praze), Geologie (PřF UK v Praze), Ekologie a ochrana životního 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 a oborových komisích.

V průběhu letního semestru 2020/2021 a zimního semestru 2021/2022 přednášeli pracovníci ústavu v uvedených programech téměř 400 hodin.

Doktorské studijní programy (DSP):

V rámci společných akreditací s:

FCHT Vysoké školy chemicko-technologické v Praze v DSP Chemie a chemické technologie a Chemie,

PřF Ostravské univerzity v DSP Analytická chemie heterogenních procesů

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

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 účastní vedení prací v DSP Chemie (PřF UK), DSP Anorganická chemie a Anorganická technologie (FCHT Univerzita Pardubice) a v DSP Materiálové vědy a analýza materiálů (Fakulta strojního inženýrství, UJEP, Ústí nad Labem).

V r. 2021 pracovalo pod supervizí ústavních školitelů 17 studentů DSP. 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) Pokročilé stavební 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 žáropevných materiálů se zvýšenou odolností vůči působení kyselin a nové materiály pro stínění neutronů s vysokými obsahy práškových hydroxidů hlinitých. Tyto materiály jsou určeny pro jaderná úložiště.

3a-2) Nové anorganické materiály pro jaderný průmysl a úložiště

Partner: Centrum výzkumu Řež, s.r.o.

Poskytovatel: TA ČR (projekt TK01030130)

Dosažený výsledek: Byla vypracována syntéza materiálů na bázi geopolymérů s vysokými obsahy práškových vápenců a dolomitů s uplatněním jako materiály pro sanace jaderných havárií.

3a-3) 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 2021 byly uzavřeny práce na optimalizaci složení a postupu aplikace transparentního nanokompozitního systému na bázi nanočástic SiO_2 a TiO_2 pro samočisticí úpravu povrchů historicky cenných objektů. Byla prokázána vhodnost těchto materiálů zejména pro anorganické podklady jako pískovec, beton apod. Cílem projektu je zavedení výroby fotokatalytických nátěrových hmot v podniku BaL Teluria Letovice.

3a-4) Inovativní sorbenty na bázi zeolitu modifikovaného iontovou kapalinou pro sorpci a detekci uranu a těžkých kovů

Partner: ÚJV, 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. Sorbenty jsou kompozity se zeolitem a grafenovými materiály modifikovanými iontovými kapalinami. V roce 2021 byla optimalizována příprava CPE elektrody a je podána patentová přihláška.

3a- 5) Solární dekontaminace povrchové vody pomocí plovoucího fotokatalyzátoru se synergickou sorpční funkcí

Partner: SCHEM, a.s., ÚFCH J.H. AV ČR, Giang Son Environment Science & Technology Co., Ltd. (firma ve Vietnamu), Vietnam National University of Agriculture, Hanoi (vědecké pracoviště ve Vietnamu)

Poskytovatel: TA ČR, DELTA2 (TM02000067)

Dosažený výsledek: Byly charakterizovány jednotlivé složky plovoucího kompozitního fotokatalyzátoru se synergickou sorpční funkcí a realizovány syntézy fotokatalyzátorů na bázi nanokrystalického oxidu titaničitého s vybranými dopanty. Povrchovým dopováním fotokatalyzátoru fluorem byla dosažena hydrofobizace syntetizovaných fotokatalyzátorů. Byly realizovány předběžné experimenty, příprava odlehčených sorbentů na bázi korku zpracovaného při různých teplotách za anaerobních podmínek a proveden výběr vhodné koloidní formy oxidu křemičitého jako pojiva kompozitního fotokatalyzátoru. Materiál je vyvíjen pro odstraňování vysoce stabilních chlorovaných toxických polutantů.

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

V r. 2021 byly uzavřeny hospodářské smlouvy s 19 odběrateli a bylo řešeno 5 projektů smluvního výzkumu.

Nejvýznamnější výsledky:

3b – 1) Materiály pro jaderný průmysl

Zadavatel: Škoda JS a.s., Plzeň

Anotace: Dlouhodobá spolupráce ve vývoji funkčních materiálů zaručujících splnění náročných legislativních podmínek pro bezpečnostní technologie zpracování jaderných odpadů.

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

3b – 2) Studie dlouhodobé stability nově vyvíjených látek pro farmacii

Zadavatel: Quinta Analytica, s.r.o.

Anotace: V roce 2021 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 metodou, kterou nemá zadavatel k dispozici. Tyto analýzy jsou součástí výzkumu a vývoje na pracovišti zadavatele.

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

Zadavatel: ÚJEP Ústí n/L, Fakulta strojního inženýrství

Anotace: Dlouhodobá spolupráce ve vývoji anorganických kombinovaných funkčních nátěrů hliníku nebo oceli pro vysokoteplotní aplikace.

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

3b – 4) Analýza vstupních materiálů a reakčních produktů při vývoji nových senzorů

Zadavatel: Innovative Sensor Technology, s.r.o.

Anotace: Pomocí práškové rentgenové difrakce, techniky, která není u zadavatele k dispozici, byla kontrolována fázová čistota vstupních materiálů. Dále bylo studováno fázové složení produktů syntézy materiálů používaných při vývoji nových senzorů.

Uplatnění: Podpora projektů výzkumu a vývoje na pracovišti zadavatele.

3b – 5) Komparativní analýza vzorků hydratovaných cementových matic metodou práškové rentgenové difrakce

Zadavatel: Centrum výzkumu Řež, s. r. o.

Anotace: Expertní a konzultační činnost, metodická podpora a srovnávací analýzy vstupních materiálů, hydratovaných cementových matic. Dlouhodobá spolupráce při testování stability materiálů vyvíjených pro využití v jaderné energetice. Srovnávací testy a metodický vývoj postupů kvalitativní fázové analýzy a testování výpočetních postupů kvantitativní fázové analýzy. Obě pracoviště jsou vybavena shodnou

přístrojovou technikou, proto je kladen důraz na tyto mezilaboratorní testy.
Uplatnění: Podpora projektů výzkumu a vývoje na pracovišti zadavatele, například projekty TAČR.

3c) Další spolupráce v oblastech s aplikačním potenciálem

Betonext s.r.o. - spolupráce na vývoji ekologických betonů,
Škoda JS, a.s. - vývoj konstrukčních materiálů pro jaderný průmysl,
New Human Solution s.r.o. - prostředky pro stabilizaci vody.

3d) Patenty, užité vzory, vynálezy

V r. 2021 nebyl udělen žádný patent.

V r. 2021 byly uzavřeny tři licenční smlouvy:

Licenční smlouva na přípravu PUC betonů a malt s BETONEXT s.r.o., Praha
Jedná se o původní přípravu anorganických betonů a malt pro technicky méně náročné stavby a městské mobiliáře.

Licenční smlouva na přípravu anorganických funkčních nátěrů pro úpravu vody s New Human Solution s.r.o., Boršov nad Vltavou

Licencována byla původní příprava anorganických funkčních povlaků pro úpravu vod.

Licenční smlouva na přípravu fotokatalytických aditiv do betonu s BETOSAN, s.r.o.

Licencována byla původní příprava objemových a povrchových fotokatalytických aditiv do betonů.

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 byl 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.

4a-2) Green Ultrafiltration Water Cleaning Technologies (GreenWaterTech, H2020 M-ERA.NET 2 Cofund, 6 spoluřešitelů, 3 účastnické státy)

Projekt cílí na vývoj nových technologií pro čištění vod. ÚACH se účastní na syntézách nanomateriálů a jejich charakterizaci.

4b) Konference s mezinárodní účastí, které ÚACH spolupřádal

V r. 2021 se ústav účastnil pořádání pěti konferencí s mezinárodní účastí.

4b – 1) 25. kongres Mezinárodní krystalografické společnosti

Datum a místo konání akce: 14. – 22. 8. 2021, Kongresové centrum Praha (+on-line)

Hlavní pořadatel: Krystalografická společnost, z. s.

Spolupořadatelé: Karlova univerzita v Praze (MFF, PŘF), Jihočeská univerzita (PŘF), Masarykova univ. (PŘF), ÚOCHB AV ČR, BTÚ AV ČR, FzÚ AV ČR, ÚACH AV ČR)

Počet účastníků celkem/z toho ze zahraničí: 1700/1580

Internetové stránky akce: <https://iucr25.org>

4b – 2) Nanocon 2021

Datum a místo konání akce: 20. – 22. 10. 2021, Brno

Hlavní pořadatel: Palackého univerzita v Olomouci

Spolupořadatelé: Tanger, spol. s r. o.; Česká společnost pro nové materiály a technologie; ÚACH v rámci konference organizoval workshop

Počet účastníků celkem/z toho ze zahraničí: 280/61

Internetové stránky akce: <https://www.nanocon.eu>

4b – 3) Interakce anorganických klastrů, klecí a kontejnerů se světlem

Datum a místo konání akce: 16 – 18. 11. 2021, zámek Liblice

Hlavní pořadatel: Ústav anorganické chemie AV ČR

Spolupořadatel: -

Počet účastníků celkem/z toho ze zahraničí: 30/7

Internetové stránky akce: <https://www.iic.cas.cz/wp-content/uploads/2021/11/Liblice-2021-abstracts.pdf>

4b – 4) 3rd European Workshop on Metal Phosphonates and Phosphinates

Datum a místo konání akce: 16. – 18. 9. 2021, zámek Liblice

Hlavní pořadatel: Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i.

Spolupořadatel: -

Počet účastníků celkem/z toho ze zahraničí: 45/15

Internetové stránky akce: <https://www.europhosphonates.iic.cas.cz/>

4b – 5) Kovová mýdla v malbách: Historie, chemie a krystalografie

Datum a místo konání akce: 13. 7. 2021, Ústav anorganické chemie AV ČR (+ online)

Hlavní pořadatel: Ústav anorganické chemie AV ČR

Spolupořadatel: -

Počet účastníků celkem/z toho ze zahraničí: 25/5

Internetové stránky akce: <https://www.iic.cas.cz/seminar-metal-soaps-in-paintings-history-chemistry-and-crystallography/>

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: studium antivirotických/antibakteriálních vlastností nanomateriálů; partneři: Division of Microbiology, Department of Pathology, Faculty of Veterinary Medicine, Wrocław University of Environmental and Life Sciences, Wrocław, Polsko; Department of Physiology, Faculty of Medical Sciences in Zabrze, Medical University of Silesia, Katowice, Polsko.

Téma: orientované tenké vrstvy multiferoických hexagonálních feritů s magneticky indukovanou elektrickou polarizací; partneři: Center for Novel States of Complex Materials Research, Department of Physics and Astronomy, Seoul National University, Seoul, South Korea; Instituto de Nanociencia de Aragón, University of Zaragoza, Zaragoza, Spain.

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: nové fosfonátové a fosfinátové koordinační polymery a jejich praktické použití; partner: University of Crete, Řecko.

Téma: studium polovodivých vlastností koordinačních polymerů; partner: TU Berlin, Berlin, Německo.

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

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: Strukturní a teoretické studie boranových a metallaboranových klastrů; partner: Newcastle University, School Nat & Environm Sci, Newcastle, Velká Británie.

Téma: Studium karborany modifikovaných povrchů a kovových nanoklastrů; partner: Indian Institute of Technology, Department of Chemistry, Tamil Nadu, Indie.

Téma: Strukturní a teoretické studie heteroboranových klastrů; partner: Auburn University, Department Chemistry & Biochemistry, Auburn, USA.

Téma: tvorba kovových mýdel v barevné vrstvě malířských děl; partneři: University of Amsterdam a Rijksmuseum Amsterdam, Nizozemí.

Téma: analýza moderního umění, syntetické pigmenty a jejich degradace; partner: Akademie der Bildenden Künste Wien, Institute of Science and Technology in Art (ISTA), Vídeň, Rakousko.

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. 2021 uzavřeny smlouvy v hodnotě 1260 tis. Kč.

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

K odstranění nedostatků v hospodaření zjištěných při kontrole provedené Kontrolním odborem AV ČR byl vydán Příkaz ředitele k odstranění nedostatků vyplývajících

z kontroly hospodaření, který je plněn průběžně.

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. 2021 s vyrovnaným rozpočtem.

Výše institucionální neinvestiční dotace poskytnuté z rozhodnutí zřizovatele v r. 2021 byla přibližně o 4,4 % vyšší než v r. 2020. Vedle institucionální dotace byla v r. 2021 část rozpočtu ústavu (cca 38 % neinvestičních nákladů) tvořena účelovými prostředky (Horizont 2020, MŠMT, 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 (1260 tis. Kč, viz výše) byl v r. 2021 v rámci hlavní činnosti realizován smluvní výzkum ve výši 1436 tis. Kč. Výnosy z uzavřených licenčních smluv činily 108 tis. Kč. Příjmy ze smluv a licencí doplňují rozpočet ústavu tvořený převážně dotacemi ze státních prostředků.

VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště:

Vývoj činnosti ÚACH bude v souladu s jeho posláním směřován na různé aspekty anorganické chemie. Anorganická chemie se dynamicky vyvíjí a její vliv přerůstá i do jiných oblastí přírodních věd, jako jsou materiálové, fyzikální, bio a environmentální vědy a další. Naše znalosti metod syntéz, fotochemie, analýzy pevných látek, analytické a kvantové chemie, katalýzy a dalších oblastí chemie nám umožňují aktivní práci na řadě multidisciplinárních projektů na mezinárodní úrovni. Objevujeme nové molekuly, nanomateriály a materiály se specifickými vlastnostmi, např. luminiscenčními, optickými, sorpčními, katalytickými. Tyto produkty nabízejí široké spektrum využití, např. pro odstraňování toxických látek, pro konstrukci baktericidních povrchů, jsou komponenty senzorů či laserů, účinnými katalyzátory nebo mohou být využity pro diagnostiku a terapii v medicíně. Náš chemický pohled také přispívá k rozvoji geochemie a umožňuje hodnotit výtvarná díla z hlediska jejich původnosti, stáří a provenience. 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 2022 vycházejí z výzkumných záměrů ÚACH a z výsledků národních a mezinárodních projektů dosažených v předchozích letech, které mají přesah do roku 2022 a dále.

Budeme pokračovat v designu, přípravě a charakterizaci fotoaktivních anorganických molekul a (nano)materiálů na bázi přechodných kovů pro teranostiku. Aktivita těchto biomateriálů je založena na jejich foto-, respektive radiosensitizačních, vlastnostech. Jedná se o komplexy Zr, Pd, Ir nebo oktaedrické klastrové komplexy Mo₆, Re₆ a dalších přechodných kovů, které budou použity samostatně nebo budou asociovány

s biokompatibilními polymery (PEG, HPMA, PLGA). Budeme je využívat v souvislosti s fotodynamickou terapií rakovinových buněk (PDT) a antimikrobiální fotodynamickou terapií. V oblasti PDT se hlavně zaměříme na fotodynamickou terapii indukovanou rentgenovým zářením (X-PDT). Chceme také využít Mo_6 s vysokým obsahem atomů ^{11}B pro Boron Proton Capture Therapy. Cílenou terapii chceme dosáhnout modifikací navržených systémů peptidy. Testování bude probíhat *in vitro* a *in vivo* na myších modelech.

Pokračovat bude rovněž vývoj ICR fosfinátových MOFů, především z hlediska nových struktur a jejich aplikačního potenciálu. Konkrétně se jedná o syntézu nových linkerů, například molekul majících více funkčních skupin, a využití relevantních koligandů při krystalizaci MOFů. Laděním chemického složení stěn pórů se zaměříme na přípravu MOFů pro separace nebo materiály s vysokou protonovou vodivostí. Dále budeme studovat stabilitu MOFů ve vodných roztocích a puřech a mechanismy jejich hydrolyzy. Tyto informace nám mají umožnit stanovit podmínky ke zpomalení hydrolyzy MOFů, abychom mohli rozšířit jejich aplikovatelnost ve vodných prostředích.

Budeme rozvíjet problematiku nového porézního polymeru, tzv. *Aktivního Boranu*, který jsme vyvinuli v roce 2021. Hlavním záměrem je popsat mechanismus jeho vzniku, jeho strukturu, variabilitu složení a vliv složení na jeho vlastnosti, prozkoumat jeho aplikační potenciál (sorpční materiál, heterogenní katalýza) a tak vytvořit nový směr výzkumu na mezinárodní úrovni.

Budeme studovat vlastnosti oxidických (nano)materiálů, hlavně variabilitu připravených forem CeO_2 s rozdílnou strukturou defektů a povrchovou chemií, se zaměřením na jejich adsorpční a degradační vlastnosti. Jedná se o rozkladné procesy organofosforečnanů a dalších kontaminantů nacházejících se v životním prostředí (tzv. CEC – contaminants of emerging concern), např. rezidua léčiv, endokrinní disruptory a biopolutanty (viry, bakterie), které se mohou vázat (a také degradovat respektive deaktivovat) na povrchu nano(částic) CeO_2 . Vysoké afinity CeO_2 k fosforu a potenciální schopnost defosforylovat DNA/RNA lze využít také k odstraňování, tzv. ARG (antibiotic resistant genes), které mohou ve vodách způsobovat antibiotickou rezistenci. V této souvislosti budeme spolupracovat s Univerzitou J. E. Purkyně v Ústí nad Labem na tématu pseudo-enzymatické aktivity CeO_2 , jejíž výsledky mohou najít využití v biomedicině.

Práškové oxidické (nano)materiály budeme také deponovat na polymerních nanovláčkách ve spolupráci s Univerzitou J. E. Purkyně v Ústí nad Labem. Cílem je připravit nanovláčkové struktury s funkční vrstvou nanočástic, které jim propůjčí adsorpční/degradační, popř. antivirotické vlastnosti. Zajímají nás také toxikologické vlastnosti připravovaných nanostrukturních forem CeO_2 (a nejen jich) pro vodní organismy. Je to důležitý parametr nutný k aplikacím těchto materiálů, např. v technologii čištění vod.

Budeme pokračovat ve studiu dielektrických, magnetických a magnetoelektrických vlastností hexagonálních feritů ve formě orientovaných keramik a vrstev vykazujících magnetoelektrický (ME) jev s cílem dosažení ME jevu při pokojové teplotě.

Ve spolupráci s FSI UJEP budou připraveny a studovány $2\text{DTiO}_2@i\text{-MXenes}$ nanokompozity jako vhodné fotokatody (fotoanody) při solárním rozkladu vody. Struktura imobilizovaných MXene vrstev bude studována pomocí optické a rastrovací elektronové mikroskopie, jejich složení bude ověřeno pomocí rentgenové difrakce

resp. fotoelektronové spektroskopie a fotoelektrochemické vlastnosti budou stanoveny pomocí lineární voltametrie.

Výzkum sorbentů radionuklidů a těžkých kovů bude rozšířen na kompozitní materiály na bázi TiO_2 /ferrokyanidu. Dále bude pokračovat výzkum kompozitního materiálu na bázi zeolitu s 2D uhlíkovým materiálem modifikovaným iontovými kapalinami obsahujícími kov jako homogenní katalyzátor. Imobilizací těchto iontových kapalin na 2D materiálech budou připraveny materiály jako heterogenní katalyzátory pro polymeraci s otevřením kruhu. Bude pokračovat spolupráce 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 stereochemie a vnesených fyzikálně-chemických vlastností. Budeme dále pokračovat ve vývoji (poly)substituovaných metallakarboranových sendvičových strukturních bloků, které lze využít jako stavební jednotky v nanochemii a farmakologii. Budou také probíhat strukturní studie známých i nových typů sloučenin založené na kvantově chemických výpočtech a difrakčních metodách a studie fyzikálně-chemických vlastností.

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

Nadále bude probíhat studium fyzikálně chemických dějů, ke kterým dochází při tvorbě monomolekulárních vrstev substituovaných (kar)boranů na povrchu kovu. Především bude studována samoskladná tvorba vrstev u thiolových derivátů klastrových borátových aniontů.

Předběžné výsledky naznačují, že boreniové soli mají luminiscenční vlastnosti, které jsou významně ovlivněny koordinačním okolím kationtového boru. Pro hlubší pochopení tohoto chování bude připravena série boranyliových solí s důrazem zejména na vztah mezi jejich strukturou, reaktivitou a fotofyzikálními vlastnostmi. Díky Lewisovskému kyselému charakteru připravených látek budou tyto sloučeniny také studovány jako katalyzátory v reakcích typu metal free C-H aktivace, hydroborace či redukce CO_2 .

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. Bude dále rozpracována chemie látek s antibakteriálním účinkem se zaměřením na nové metody pro vnesení málo nukleofilních substituovaných amino skupin na atomy uhlíku v kobalt bis(dikarbollidu) a účinnost látek proti resistantním kmenům bakterií.

Bude probíhat systematická elektrochemická charakterizace různých typů substituovaných klastrových sloučenin boru a studium metod pro biokonjugaci s cílem optimalizace laditelné elektrochemické odezvy.

Bude probíhat studium chiralit borových klastrových sloučenin a metod pro separaci enantiomerů s ohledem na vliv chiralit na biologické vlastnosti aktivních sloučenin.

V rámci studia kulturního dědictví bude pokračovat výzkum portrétních miniatur 17. až 19. století, malovaných na různých podložkách – slonovině, kovu, papíru, skle. Závěrečná fáze výzkumu miniaturních portrétů se zaměří na specifikaci

materiálových znaků jednotlivých škol a autorů, což pomůže kategorizaci našich sbírkových fondů. V rámci této fáze budou též interpretovány nejdůležitější nalezené projevy degradací miniatur, a to ve vazbě na diskuzi vhodných památkových postupů jejich ochrany. Provenienční výzkum se nově zaměří na pigmenty pozdně-gotického období a jejich vztah k novým těžbám v bohatých hornických regionech střední Evropy. Například půjde o výrobu pigmentového smaltu z kobaltových rud v Krušnohoří nebo o srážení zelené malachitové barvy z důlních vod při těžbě měděných rud na Slovensku. Cílem bude opět nalezení charakteristických znaků (strukturních, morfologických, chemických apod.) u výsledných pigmentů, které umožní trasovat původ surovin a dobově nebo místně specifickou technologii jejich výroby - to pak pomáhá zpřesňovat dataci a regionální určení výtvarných děl. Předpokládá se přitom využití pokročilých metod analýzy stopových prvků, např. PIXE. Experimentální výzkum tvorby kovových mýdel bude dále pokračovat s akcentem na procesy krystalizace mýdel, což může být faktor určující výslednou rizikovitost celého procesu pro stabilitu malby. Do studia vícesložkových systémů bude nově zahrnuta i tvorba mýdel v moderních malbách, zejména tedy mýdla zinečnatá nebo méně běžná kadmennatá.

V oboru environmentální geochemie budou pokračovat výzkumné aktivity zaměřené na ohniska (*hot spots*) znečištění rtutí v nivě přítoků Ohře z Německa a kadmiiem a zinkem v nivě Litavky, Berounky a Vltavy. Zaměříme se především na přestup těchto kovů do bioty, konkrétně do rostlin, které zmíněné kovy akumulují. Tato akumulace představuje především v případě kadmia hrozbu pro potravní řetězec, jejíž význam není dnes doceněn. Dále budeme zkoumat důsledky kontaminace horního toku Ohře rtutí s cílem vyhodnotit budoucí transport znečištění dále říčním tokem. Pokračovat bude také studium přestupu manganu do listů stromů v horských lesích, který patrně představuje důsledek acidifikace horských půd kyselými dešti. Využití tohoto jevu je uvažováno k mapování oblastí horských lesů ČR, postižených acidifikací.

Naše aplikační záměry

Budeme pokračovat ve vývoji (i) pokročilých konstrukčních materiálů a speciálních „obětních“ materiálů pro jaderný průmysl a nízkoalkalických betonů pro jaderná úložiště, (ii) systémů a zařízení pro reakční a suspenzní anorganický 3D tisk, (iii) anorganických nátěrů zajišťujících funkční úpravy povrchů kovů pro vysokoteplotní aplikace, (iv) ekologických a žárovzdorných pojivových systémů z odpadních surovin s cílem částečně nahradit portlandské cementy.

VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí:

Pracovníci ÚACH 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.

Díky nově zahájenému mezinárodnímu projektu GreenWaterTech (Horizon 2020 Co-funds) se intenzivně zabýváme vývojem adsorbentů na bázi oxidů kovů (zejména CeO_2). Ve spolupráci s kolegy ze Švédska (Uppsala University, Swedish University of Agricultural Sciences) a Francie (Ecole Normale Supérieure de Lyon, CNRS Lyon) a několika firmami vyvíjíme jednoduchou a relativně levnou metodu přípravy sorbentů i ve velkých měřítcích (stovky gramů až kilogramy), které budou vázat a rozkládat polutanty nacházející se ve vodách. Tyto sorbenty jsou zaměřeny na odstraňování tzv. polutantů vzbuzující obavy (CEC – contaminants of emerging concerns), např. pesticidů, reziduí léčiv, endokrinních disruptorů a biopolutantů (víry, bakterie, ARGs).

Pokračujeme ve vývoji speciálních anorganických systémů pro přípravu „obětních“ a nízkoalkalických materiálů, jejichž použití zvýší bezpečnost provozu jaderných elektráren a úložišť v ČR. „Obětní“ materiály slouží k sanaci roztaveného jaderného paliva při havarijních situacích a nízkoalkalické materiály zvyšují stabilitu úložišť.

Po přijetí evropského projektu " Zelená dohoda pro Evropu" se zásadně změnil dosud neurčitý přístup cementáren a betonárek v ČR k emisím CO_2 a začínají iniciativně hledat náhrady portlandského cementu. Z tohoto pohledu se spolupráce s privátním investorem na vývoji ekologických cementů a betonů v minulých letech ukázala jako vysoce prozíravá a perspektivní a v roce 2021 byla uzavřena první licenční dohoda na "pucolánové ekologické betony". ÚACH tak chce přispět ke splnění závazků ČR při snižování emisí skleníkových plynů. ÚACH se také intenzivně věnuje zpracování odpadních surovin (např. popílků) s cílem maximálně nahradit ekologicky náročné portlandské cementy.

Vyvíjíme vysoce ekologické prostředky pro sanace zateplených omítek napadených zelenou řasou a černou plísní. V současné době aktuálně hledáme soukromého investora pro velkorysé a rozsáhlé testování těchto nových původních prostředků.

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

elektrickou energii.

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 či těžkých kovů. Záměrem této spolupráce je dekontaminace vody po starých haváriích, rekultivace po těžební činnosti a využití těchto materiálů k monitorování kontaminantů.

V rámci nové spolupráce s Ústavem pro hydrodynamiku AV ČR, v.v.i. se zaměřujeme na výzkum úpravy pitné vody (odstranění Mn, mikroplastů a organických polutantů).

Budeme pokračovat ve studiu (*hot spots*) znečištění rtutí v nivě přítoků Ohře z Německa, kadmiem a zinkem v nivě Litavky, Berounky a Vltavy. Zaměříme se na přestup těchto kovů do rostlin, které je akumulují, což především v případě kadmia znamená hrozbu pro potravní řetězec.

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. 2021 bylo v ústavu zaměstnáno 82 fyzických osob (FO).

Struktura zaměstnanců ústavu

Počet zaměstnanců (FTE)		celkem	z toho muži	z toho ženy
		73,4	39,4	34
v tom	pracovníci ve výzkumných týmech	58,3	36,1	22,2
	administrativní pracovníci	11	1	10
	techničtí a další pracovníci	4,1	2,3	1,8

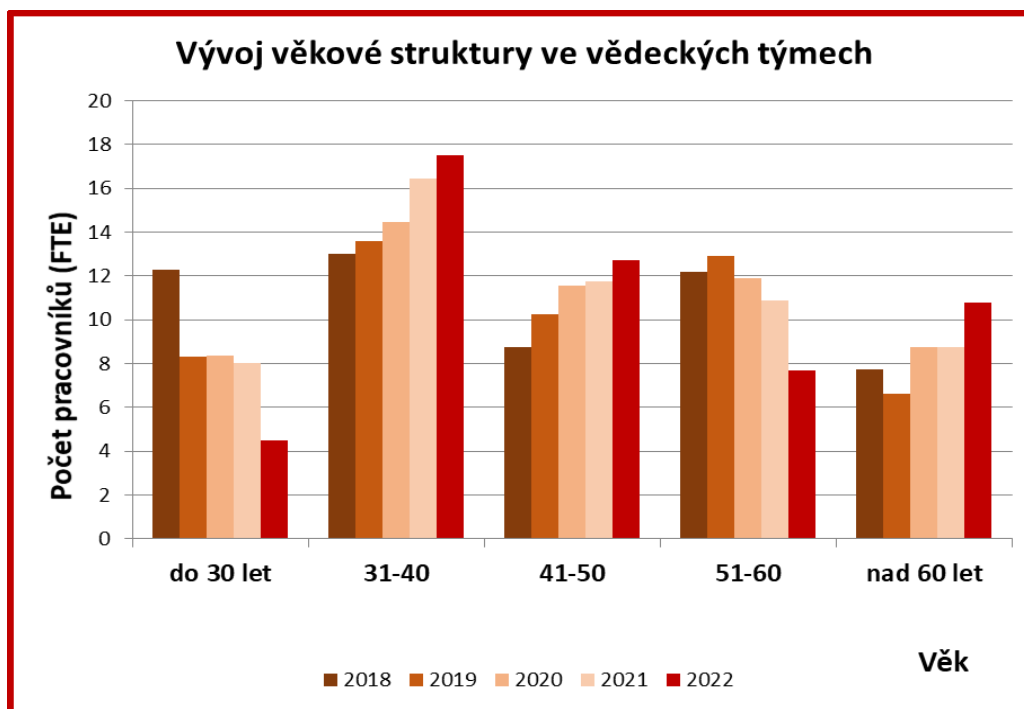
Z uvedené tabulky vyplývá, že cca 80 % pracovní kapacity zaměstnanců ústavu tvořili pracovníci ve výzkumných týmech. Z těchto pracovníků (FTE) mělo 91 % ukončené VŠ vzdělání a z nich bylo 70 % vědeckých pracovníků (získali Ph.D. titul nebo jeho ekvivalent) a 15 % studentů doktorského studia.

V roce 2021 pracovní poměr ukončilo 6 pracovníků. Byli přijati 4 pracovníci, kteří byli zařazeni do výzkumných týmů, z nich 1 doktorand a 1 postdoktorand. Při přijímání nových pracovníků je kladen důraz především na odbornost, vědeckou úroveň a perspektivu pracovníka.

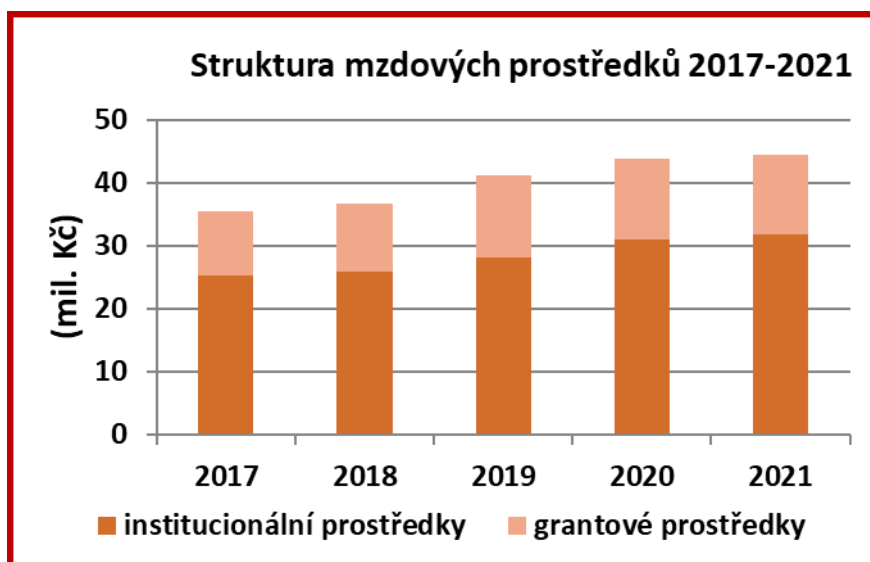
Vedení ústavu věnuje setrvalou pozornost studentům DSP i pregraduálním studentům, jejichž práce probíhá pod supervizí ústavních školitelů. Studenti spolupracují při řešení výzkumných projektů a aktivně se účastní prezentace výsledků včetně účasti na mezinárodních konferencích. Po úspěšné obhajobě diplomové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

Věková struktura výzkumných pracovníků ústavu je příznivá. V následujícím obrázku je zobrazen vývoj věkové struktury výzkumných pracovníků v letech 2018 – 2021 s výhledem na r. 2022. 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 v r. 2021 je 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. 2021 činily cca 71 % z celkem vyplacených mzdových prostředků. Průměrná mzda ve výši 50 821 Kč přesahuje celoakademický průměr o cca 4 000 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^{**)}



Výroční zpráva o poskytování informací za rok 2021

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

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

1. Počet podaných žádostí o informace
0

2. Počet vydaných rozhodnutí o odmítnutí žádosti
0

3. Počet podaných odvolání proti rozhodnutí
0

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

Nebyl vydán žádný rozsudek soudu.

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

Nebylo vedeno žádné sankční řízení

6. Výčet poskytnutých výhradních licencí včetně odůvodnění nezbytností poskytnutí výhradní licence
3

^{**)} Údaje požadované dle §18 odst. 2 zákona č. 106/1999 Sb., o svobodném přístupu k informacím, ve znění pozdějších předpisů.

1. Výhradní licence byla poskytnuta společnosti BETOSAN s.r.o., která je spolumajitelem výsledku a držela spolumajitelský podíl na výsledku. Z toho důvodu byly zbylé spolumajitelské podíly výhradně licencovány této společností.

2. Výhradní licence byla poskytnuta společnosti BETONEXT s.r.o., která dlouhodobě spolufinancuje úhradu nákladů souvisejících s vývojem nových materiálů.

3. Výhradní licence byla poskytnuta společnosti New Human Solution s.r.o., která dlouhodobě spolufinancuje úhradu nákladů souvisejících s přípravou funkčních nátěrů ocelových povrchů vhodných pro úpravu a stabilizaci vody.

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 2021 jako její samostatná část s názvem „Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb., o svobodném přístupu k informacím“.

14. ledna 2022



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 ústavu

Přílohou výroční zprávy je účetní závěrka a zpráva o jejím auditu