

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

IČ: 61388980

Sídlo: Husinec-Řež

Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2022

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 9. 6. 2023

Radou pracoviště schválena dne: 20. 6. 2023

V Řeži dne 3. 3. 2023

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 pro období 1. 1. 2022 – 31. 12. 2026:

předsedkyně: **Ing. Silvie Švarcová, Ph.D., ÚACH AV ČR, v. v. i.**

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

členové:

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

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

Ing. Jiří Henych, Ph.D., ÚACH AV ČR, v. v. i.

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

RNDr. Mariana Klementová, Ph.D., FzÚ AV ČR, v. v. i.

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

RNDr. Jan Nekvinda, Ph.D., ÚACH AV ČR, v. v. i.

Ing. Zdeňka Sedláková, CSc., ÚMCH AV ČR, v. v. i.

prof. Dr. Ing. David Sedmidubský, VŠCHT

Dozorčí rada pro období 1. 5. 2022 – 30. 4. 2027:

předseda: **RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc., AR AV ČR**

(pětileté funkční období od 20. ledna 2021 do 19. ledna 2026)

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

Od 1. 1. 2022 pracuje Rada ústavu v novém složení, viz I.a).

c) Informace o činnosti orgánů

Ředitel:

V r. 2022 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,
- formulace koncepce výzkumné činnosti Ústavu pro následující období,
- řádné vedení účetnictví,
- 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,
- dohled nad implementací Plánu genderové rovnosti.

V průběhu r. 2022 byly vydány čtyři interní předpisy (IP): IP č. 116 – Pro navrhovatele a řešitele projektů, IP č. 117 – Komise pro transfer technologií, IP č. 118 – Atestační komise a IP č. 119 – Organizační řád. Byl vydán Příkaz ředitele k provedení inventarizace hospodářských prostředků v r. 2022. Dále byla vydána Směrnice ředitele pro účely poskytování cestovních náhrad v roce 2022 se třemi dodatky a Metodika vykazování skutečných nepřímých nákladů projektů výzkumu a vývoje v r. 2022.

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. 2023.

Přístrojové vybavení ústavu bylo v r. 2022 doplněno o hmotnostní spektrometr s ESI a APCI sondou a vysokým rozlišením v tandemovém uspořádání s HPLC (cena 11 058 190 Kč, dotace AV ČR, 20 % spoluúčast ústavu). V součinnosti s Technickou komisí a s přihlédnutím k požadavkům jednotlivých oddělení a laboratoří byl vypracován plán nákladných oprav a akvizicí přístrojového vybavení pro další období.

V r. 2022 bylo řešeno 19 projektů VaV v programech GA ČR (9), TA ČR (4), MŠMT (2), MK (1), Horizont 2020 (1) a další projekty byly podporovány zřizovatelem (např. Strategie AV 21, Mobility plus). Účelové prostředky plynoucí z podpory zmíněných poskytovatelů do rozpočtu představovaly cca 31 % neinvestičních nákladů ústavu. Mzdové prostředky vyplacené z účelových dotací činily cca 24 %.

Rada pracoviště:

V r. 2022 se uskutečnilo 11 jednání Rady ÚACH AV ČR v. v. i.:

117. jednání, 11. 1. 2022

- Byla zvolena předsedkyně a místopředsedkyně Rady a navržena tajemnice Rady.

118. jednání, 23. 2. 2022

- Rada diskutovala využití a financování provozu nákladných přístrojů.
- Rada vznesla podnět k aktualizaci Směrnice ředitele pro navrhovatele projektů financovaných v rámci programu grantových agentur.
- Rada se zabývala procedurou projednávání grantových návrhů podávaných do soutěže GA ČR s cílem odstranění nedostatků v grantových návrzích.

119. jednání, 10. – 14. 3. 2022, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhu na udělení Prémie Otto Wichterleho Karlu Škochovi.
- Rada projednala a doporučila k podání návrh přihlášky Sněžany Bakardjievovy do grantové soutěže GA ČR 2023.

120. jednání, 25. – 28. 3. 2022, *per rollam*

- Rada projednala a s připomínkami doporučila návrhy přihlášek do grantové soutěže GAČR 2023.

121. jednání, 6. – 11. 4. 2022, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhu na zařazení Lucie Pazderové do Programu podpory perspektivních lidských zdrojů (PPPLZ), AV ČR.

122. jednání, 27. 4. – 1. 5. 2022, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu Tomáše Baše do grantové soutěže Carl-Zeiss Stiftung a návrhu projektu Michaela Londesborough do grantové soutěže EIC Pathfinder Open.

123. jednání, 23. 5. – 26. 5. 2022, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu Jiřího Henycha do výzvy Ministerstva vnitra – OPSEC 1.VS.

124. jednání, 14. 6. 2022

- Rada projednala a schválila Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ústavu za r. 2021, seznámila se se zprávou auditora o ověření účetní závěrky za r. 2021, projednala a schválila rozpočet výnosů a nákladů na r. 2022 a střednědobý výhled 2023–2024. Rada dále schválila přesun celého hospodářského výsledku za r. 2021 do Rezervního fondu.
- Rada se seznámila s probíhající přípravou plánu rovnosti žen a mužů (GEP) v ÚACH a ustanovila pracovní skupinu pro tvorbu GEP.
- Rada projednala návrh Tomáše Matyše Grygara na projednávání návrhů grantů Radou formou přímé komunikace.
- Rada se seznámila s dopisem VR AV ČR ze dne 22. 4. 2022 ohledně obezřetného zvažování publikování v časopisech společnosti MDPI z důvodu snižující se kvality recenzního řízení.

- Rada se rozhodla nepodat návrh na jmenování člena Komise pro etiku vědecké práce AV ČR.
- Rada vzala na vědomí návrh na pořádání seminářů „Science café“, které by se pravidelně konaly napříč celým Ústavem. Navrhovaná periodicita je jedenkrát měsíčně. Zahájení se předpokládá v září 2022.

125. jednání, 20. 25. 7. 2022, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu Jana Nekvindy do grantové soutěže MŠMT Inter-Excellence II, Inter-Action-LuauS23.

126. jednání, 7. 9. 9. 2022, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu Petry Ecorchard do grantové soutěže TA ČR – Prostředí pro život, Podprogramu 2 – Ekoinovace, technologie a postupy pro ochranu životního prostředí.
- Rada projednala a schválila Interní předpis IP 119 – Organizační řád
- Rada projednala a doporučila návrh na zařazení G. Karthikeyan Thirunavukkarasu do programu PPPLZ.

127. jednání, 15. 11. 2022

se nekonalo pro onemocnění většiny členů Rady.

128. jednání, 6. 12. 2022

- Rada se seznámila s aktuálním stavem úrovně cen energií a konsekventními úspornými opatřeními.
- Rada projednala a vyjádřila předběžný souhlas s převodem finančních prostředků získaných na základě hospodářských smluv za měření rentgenovou práškovou difrakcí do Rezervního fondu. Tyto prostředky budou sloužit k úhradě servisní smlouvy s firmou Malvern-PANalytical ve výši 200.000,- Kč bez DPH v r. 2023.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu Jana Hynka do grantové soutěže Operační program Jan Amos Komenský (Pokročilé materiály a nanotechnologie pro produkci, transport a skladování vodíku).
- Rada se seznámila s výsledkem genderového auditu ÚACH.
- Rada projednala a schválila návrh na změnu vymezení pojmu Shromáždění výzkumných pracovníků ve Volebním řádu ÚACH.
- Rada projednala harmonogram výběrového řízení na obsazení pozice ředitelky/ředitele ústavu pro následující funkční období, jmenovala Silvii Švarcovou předsedkyní výběrové komise, pověřila ji sestavením návrhu výběrové komise a zveřejněním oznámení o vyhlášení výběrového řízení.

Dozorčí rada:

V r. 2022 se uskutečnila 2 jednání Dozorčí rady ÚACH AV ČR v. v. i.

22. jednání, 26. 5. 2022

Dozorčí rada

- vzala se souhlasem na vědomí Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ÚACH AV ČR, v. v. i. v r. 2021,
- vzala na vědomí zprávu nezávislého auditora o ověření účetní závěrky za r. 2021,
- vyslovila souhlas s návrhem rozpočtu nákladů a výnosů na rok 2021 a 2022,
- souhlasila se střednědobým výhledem do r. 2024,
- akceptovala přehled právních jednání nad 50 tis. Kč,
- určila firmu Efekt DC, s.r.o. (IČO 62243292) auditorem na rok 2022,
- schválila zprávu o činnosti DR za r. 2021,
- zhodnotila manažerské schopnosti ředitele ÚACH Ing. Kamila Langa, CSc., DSc.

23. jednání, 9. 12. 2022

Dozorčí rada

- se seznámila s finančním plánem na r. 2023, úspěšností v grantové soutěži GA ČR, přehledem smluvního výzkumu a úspornými opatřeními přijatými vzhledem ke zvýšení cen energií.

II. Informace o změnách zřizovací listiny:

V r. 2022 nedošlo ke změně zřizovací listiny.

III. Hodnocení hlavní činnosti:

1. Vědecká činnost ústavu a uplatnění jejích výsledků

1a) Stručná charakteristika vědecké činnosti

V roce 2022 byla výzkumná činnost ústavu zaměřena na následující oblasti:

- Chemie boru
- Fotoaktivní anorganické molekuly a materiály
- Pokročilé sorpční materiály pro životní prostředí
- Ochrana kulturního dědictví
- Environmentální geochemie
- Aplikovaný výzkum

Chemie boru

Předmětem studia byly zejména:

- Borany v medicínském výzkumu
- Borany jako luminiscenční materiály
- Borany na povrchích
- Teoretická chemie polyhedrálních boranů
- Aktivní boran – porézní boranové sítě
- Borany jako palivo
- Boreniové soli jako sensory

Fotoaktivní anorganické molekuly a materiály

Výzkum se zaměřuje na syntézu a charakterizaci nových molekul, nanostrukturních materiálů a (nano)materiálů s luminiscenčními a fotosensitizačními vlastnostmi. Jedná se především o:

- Klastry přechodných kovů
- Porfyrinové sloučeniny
- Fotokatalytické materiály

Pokročilé sorpční materiály pro životní prostředí

Pro využití v environmentálních aplikacích vyvíjíme nové materiály, kterými jsou:

- Reaktivní sorpční materiály
- Koordinační polymery
- Anorganické ion-exchange materiály
- 2D materiály

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
- Studia degradačních procesů

Environmentální geochemie

Hlavní pozornost je věnována výzkumu:

- Kontaminovaných naplavenin a nádrží
- Antropogenních a přírodních geochemických anomálií

Aplikovaný výzkum

Ve spolupráci s průmyslovými partnery probíhá materiálový výzkum a vývoj s reálným aplikačním potenciálem, zaměřený zejména na:

- Anorganické materiály pro zvýšení bezpečnosti v jaderném průmyslu
- Environmentální aplikace

1b) Výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti a jejich aplikací

Nejvýznamnější výsledky byly v r. 2022 získány především v oblastech materiálové chemie a chemie boranových sloučenin:

V oblasti vývoje fotoaktivních komplexů přechodných kovů a z nich odvozených (nano)materiálů jsme se věnovali jejich designu, přípravě, charakterizaci a popisu biologické aktivity. Aktivita těchto biomateriálů je založena na jejich foto-, respektive radiosensitizačních vlastnostech, které jsme v některých případech detailně popsali. V této souvislosti jsme spolupracovali na využití těchto biomateriálů pro fotodynamickou terapii rakovinových buněk (PDT) a antimikrobiální fotodynamickou terapii. V oblasti PDT jsme se zaměřili na fotodynamickou terapii indukovanou rentgenovým zářením (X-PDT). Syntetizovali jsme nové typy molybdenových klastrů a jejich nanočástice, které byly použity samostatně, nebo byly asociovány s biokompatibilními polymery. Nanočástice byly samy o sobě netoxické, v mnoha případech však vykazovaly výraznou fototoxicitu vůči buňkám rakoviny vaječníků a prostaty. Některé nanočástice jsme také testovali *in vivo* na myších modelech. Naše výsledky ukazují, že studované biomateriály mají potenciál pro využití v teranostice, PDT, X-PDT a pro vývoj materiálů/povrchů s baktericidními a virucidními vlastnostmi.

Dokončili jsme náš záměr zkombinovat fosfinátové a fosfonátové koordinační polymery. Prokázali jsme, že isoretikulární design umožňuje prolínání struktur obou skupin koordinačních polymerů, respektive MOFů. Dále jsme pokračovali v přípravě ICR fosfinátových MOFů s funkčními skupinami. Popsali jsme nové struktury těchto MOFů s novými linkery, které kombinují fosfinátové, dimethylaminové a karboxylátové funkční skupiny. Z těchto sloučenin vznikají struktury, které jsou isoretikulární s již publikovanou strukturou ICR-7, přičemž přítomnost funkčních skupin má významný vliv na chemickou povahu stěn pórů, ovlivňující účinnost záchytu zbytkových léčiv z odpadních vod a parametry jejich protonové vodivosti. Také jsme studovali stabilitu MOFů ve vodných roztocích a

pufrech a mechanismy jejich hydrolýzy. Tyto informace nám umožnily stanovit podmínky ke zpomalení hydrolýzy MOFů ve vodných prostředích.

Publikovali jsme první práce popisující Aktivní boran jako námi vyvinutý nový typ porézního polymeru. Popsali jsme jeho vysokou sorpční kapacitu pro emergentní polutanty. Domníváme se, že rozvoj této skupiny porézních polymerů bude probíhat v následujících letech na mezinárodní úrovni.

Ve výzkumu oxidických nanomateriálů jsme se zaměřili hlavně na studium vlastností oxidu ceričitého CeO_2 . Ve spolupráci s Univerzitou J. E. Purkyně v Ústí nad Labem (UJEP) jsme vyvíjeli nenáročné syntézy nanokrystalického CeO_2 s rozdílnými povrchovými vlastnostmi a strukturou defektů. Popsali jsme, jak tyto vlastnosti ovlivňují adsorpční a degradační schopnosti CeO_2 na odstraňování toxických polutantů, zejména sloučenin na bázi organofosforečnanů. Při studiu tzv. pseudo-enzymatických vlastností CeO_2 jsme jednak prokázali jeho vysokou fosfatázovou aktivitu, ale také jsme rozlišili mimetickou aktivitu fosfolipázy C a D na dvou biomolekulách s fosfodiesterovými vazbami. Vybrané formy CeO_2 vykazovaly i velmi atraktivní antivirotické vlastnosti vůči virům herpes simplex (HSV1, bezobalový virus) a Adenoviru 5. Popsané vlastnosti prokazují široké možnosti použití CeO_2 s definovanou strukturou v environmentálních a biologických aplikacích, a proto se jim budeme intenzivně věnovat i nadále.

V roce 2022 jsme ukázali, že boreniové soli mají luminiscenční vlastnosti, které jsou významně ovlivněny koordinačním okolím kationtového boru. Vypracovali jsme metodiku pro přípravu boreniových kationtů odvozených od fenyropyridinového skeletu a připravili sérii prekurzorů obsahující elektron donorové i akceptorové skupiny. Jejich parametrizace a fotofyzikální vlastnosti budou studovány v roce nadcházejícím.

Publikovali jsme výsledky studia strukturních, magnetických, magnetoelektrických a transportních vlastností orientovaných tenkých vrstev hexaferitů strukturního typu Z a W. V důsledku neuspořádanosti magnetických iontů jsme prokázali několikanásobný vzrůst hodnot magnetoelektrické (ME) susceptibility a elektrické polarizace.

Byla stanovena mikrostruktura a mechanické vlastnosti MAX/MXenes ve formě tenkých vrstev a práškových materiálů, které naznačují existenci heterostruktury sestávající z binárního karbidu Ti_2C a kovového prvku (Sn nebo In). MAX/MXenes ($\text{M} = \text{Ti}, \text{Hf}$) ozářené vysokoenergetickým 200 keV Ar^+ paprskem vykazují slibné mechanické vlastnosti (tvrdost a elasticitu) naznačující, že tyto MAX/MXenes materiály jsou vhodné jako ochranné nanopovlakové filmy pro aplikace v jaderném výzkumu a nanokeramiky.

Podařilo se najít vhodný nosič pro konstrukci plovoucího fotokatalyzátoru – napěněné sklo, které vyhovuje ze všech hledisek, tj. je dlouhodobě stabilní ve vodném prostředí, fotokatalyzátor na bázi systému vodní sklo – TiO_2 na něm dobře ulpívá a fotokatalytická aktivita ve vodném prostředí je dostatečná pro mineralizaci nízkých koncentrací vysoce stabilních organických polutantů.

Byl popsán vliv různých aminů na vlastnosti připravených peroxotitanicitanů a žíhaného TiO_2 . Tato syntézní procedura vede k nové metodě přípravy vysoce fotokatalyticky aktivních uhlíkem dopovaných materiálů.

Ve spolupráci s kolegy z Bratislavy byla popsána toxicita a antibakteriální vlastnosti lísťkového TiO_2 a byl detailně popsán vliv povrchového a objemového

dopování na fotokatalytické vlastnosti tohoto fotokatalyzátoru.

Za účelem sorpce radionuklidů včetně uranu a těžkých kovů jsme vyvinuli tříložkový multifunkční kompozitní materiál na bázi zeolitu (exfoliovaný grafit, grafen oxid a zeolit typu A) a dále jej modifikovali iontovými kapalinami (1,3-diethoxyimidazolium bis(trifluoromethylsulfonylimid) a 1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonylimid)). Tento systém byl použit pro přípravu CPE a byla podána patentová přihláška (Elektroda a způsob pro detekci obsahu uranu ve vodném systému).

Řada iontových kapalin na bázi imidazolu a obsahující Zn byla připravena a testována na homogenní katalýzu cyklických monomerů (epoxidů). Mechanismus reakcí bude dále studován.

Popsali jsme nový typ chirální platformy, která je založena na modifikaci kobalt bis(dicarbollid)ového aniontu rigidním můstkem a jednou či dvěma skupinami v protilehlých polohách pro připojení řady organických molekul a biokonjugací.

Rovněž jsme popsali nové Ag₂₁ nanomolekuly ve tvaru vrtule, které mají šest ramen chráněných *m*-karboran-9-thiolem a trifenylphosfinem. Prostudovali jsme orientaci nanomolekul na površích a fotofyzikální vlastnosti těchto systémů.

Byly prostudovány inserční reakce selenu do makropolyhedrálních klastrů. Byla izolována a strukturně charakterizována řada nových látek s fúzovaným skeletem. Látky byly také předmětem chemických výpočtů.

Ve spolupráci s BFÚ AV ČR byla prostudována elektrochemie řady sloučenin pro ověření jejich využití pro biokonjugaci s peptidy a DNA.

Ve spolupráci s týmem z Farmaceutické Fakulty UK byly nalezeny a popsány metody chirální separace karborátových a kobalt bis(dicarbollid)ových aniontů pomocí HPLC a byla prostudována stereochemie a chiralita základních derivátů.

Ve spolupráci s Institute of Medicinal Biology, PAN, Polsko byly připraveny nové metallakarboranové deriváty substituované ftalimidovou skupinou, které vykazují nadějnou antiparazitickou účinnost vůči hlísticím druhu *Rhabditis sp.*

Na základě chemických výpočtů byl prostudován přesmyk methylovaného 11-ti vrcholového karboranu na 12-ti vrcholový ikosaedrický trikarboranový kation.

V oboru environmentální geochemie byl nejvýznamnějším publikovaným výsledkem popis vývoje nivy řeky Jizery ve svrchním holocénu, tj. v období, kdy do české krajiny významně vstupuje člověk a jeho krajnotvorné aktivity. Práce otevřela problém rozlišení přírodního a antropogenního vlivu na nížinné řeky v posledních čtyřech tisíciletích, kde dodnes chybí nezaujatý badatelský přístup. Při studiu říčních systémů v posledních letech převládaly šablonovité přístupy a modelování, zatímco chybí dobré případové studie s nejmodernějšími výzkumnými nástroji. Tento neblahý stav se pokoušíme změnit. Datování paleomeandrů řeky Jizery naznačuje, že dřívější (prehistorické) meandrování řeky ukončila spíše změna klimatu než zesílení lidského vlivu, zatímco lidský vliv je většinou uváděn jako hlavní hybatel vývoje středoevropských a západoevropských řek od středověku.

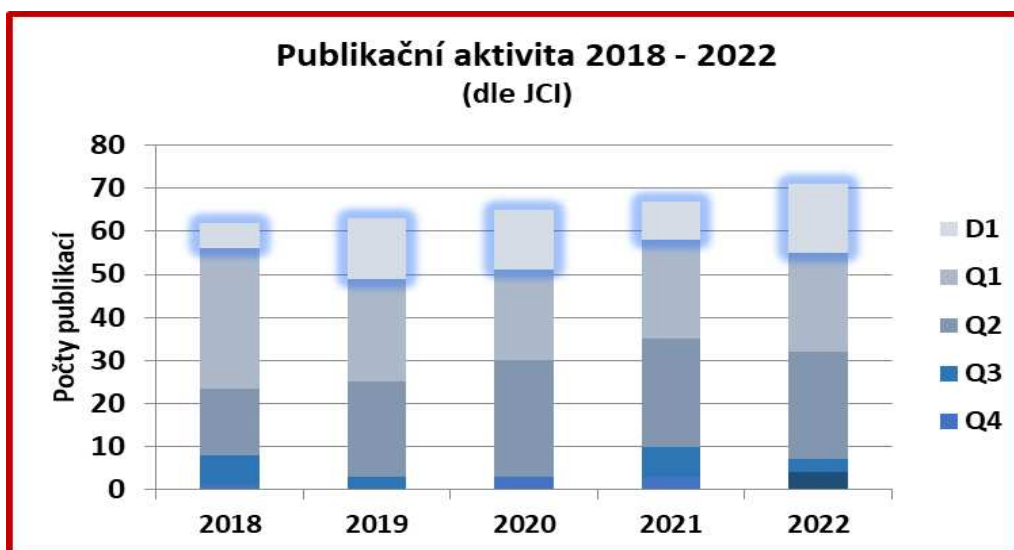
V oblasti ochrany kulturního dědictví byl dokončen projekt zabývající se neinvazivní materiálovou analýzou portrétních miniatur 17. až 19. století. Byla vypracována celá řada nových analytických postupů, které v roce 2022 vedly k certifikaci tří metodik jako výsledků aplikovaného výzkumu. Zároveň byla realizována i závěrečná výstava mapující české sbírkové fondy, kde byly zároveň

zveřejněny nejnovější poznatky týkající se stáří, autorství nebo nových dílenských zařazení studovaných miniatur. Byl také dokončen a publikován experimentální výzkum pigmentu na bázi nanočástic zlata, tzv. Cassiova purpuru, který byl v miniaturních malbách nově objeven a charakterizován. Vedle toho započal i provenienční výzkum pigmentů pozdně-gotického období ve vztahu k lokalitám jejich těžby – byl např. realizován metodický výzkum nejstarších kobalt obsahujících skel (předchůdců pigmentových smaltů) ve vztahu k technologii jejich výroby a změny ve složení charakteristických pigmentů v průběhu staletí byly studovány na nejstarší polychromované sošce v Čechách. Její výzkum mapuje i právě vydaná monografie. Experimentální studium degradačních procesů, které se aktuálně věnuje palčivému problému tvorby kovových mýdel v barevných vrstvách vedlo také k velmi zajímavým výsledkům. Jedním z nich byl například vůbec první nález rtuťnatých mýdel v reálných malbách; práce na jejich detailní charakterizaci stále probíhají.

V oblasti aplikované anorganické chemie jsme pracovali na následujících tématech:

- (i) připravili jsme a charakterizovali pokročilé konstrukční materiály a speciální „obětní“ materiály pro jaderný průmysl,
- (ii) reprodukovali jsme přípravy nízkoalkalických betonů s nízkými hodnotami pH výluhů určenými pro jaderná úložiště,
- (iii) vyvíjeli jsme systémy a zařízení pro reakční a suspenzní anorganický 3D tisk,
- (iv) dokončili jsme vývoj anorganických nátěrů zajišťujících funkční úpravy povrchů kovů pro vysokoteplotní aplikace,
- (v) pokračovali jsme ve vývoji ekologických a žárovzdorných pojivových systémů z odpadních surovin pro náhradu portlandských cementů.

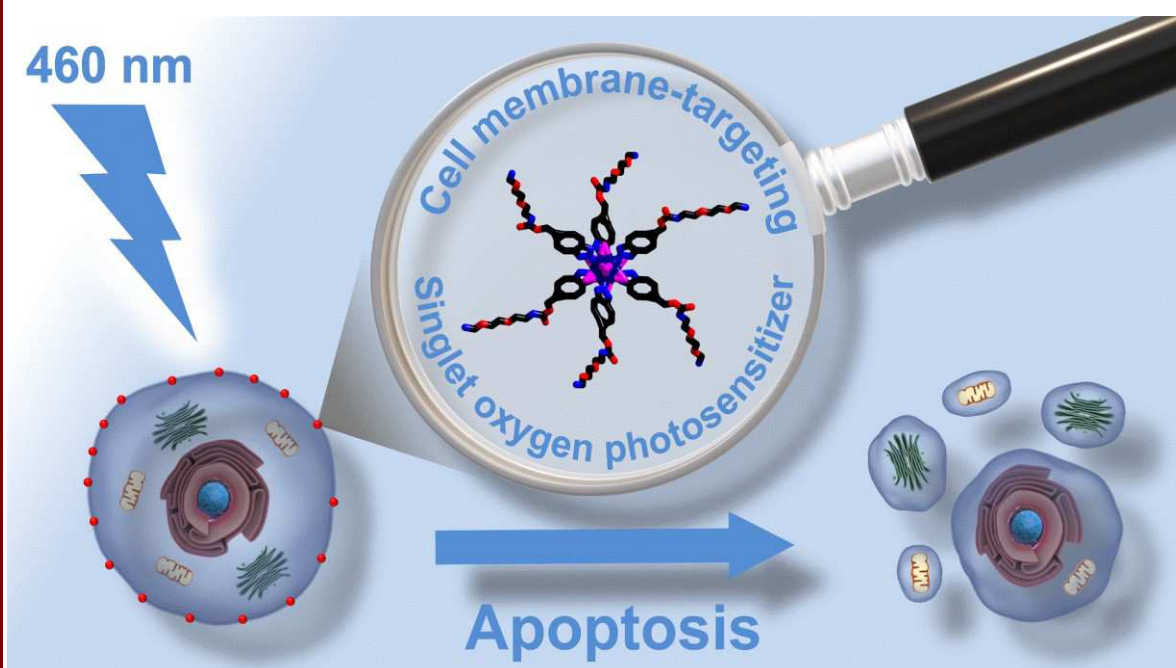
Získané výsledky byly v roce 2022 zveřejněny v 71 publikacích v mezinárodních časopisech, z toho významný podíl v časopisech, jejichž kvalita odpovídá prvnímu decilu D1 (16 článků) a prvnímu kvartilu Q1 (23 článků) v oboru (dle JCI). Na následujícím obrázku je znázorněn vývoj počtu publikací pracovníků ústavu v období 2018–2022.



Významné výsledky s uvedením citací:

(1) Nanoklastry zacílené na buněčné membrány – nová třída sloučenin pro fotodynamickou terapii?

Fotodynamická terapie je neinvazivní metoda využívající sloučeniny, které po aktivaci světlem produkují reaktivní kyslíkové částice ničící nádory i mikroorganismy. Vyvinuli jsme nové fotoaktivní nanoklastry, které cílí na buněčnou membránu. Výsledkem byl vysoký fototoxický účinek v nanomolárních koncentracích na rakovinné buňky způsobující apoptotickou buněčnou smrt s nulovou toxicitou v nepřítomnosti světla. Nanoklastry se po čase samy deaktivují v důsledku hydrolýzy, což je užitečná vlastnost pro zamezení vedlejších účinků po léčbě.



Nanoklastry pro fotodynamickou terapii:

Nanoklastry cílí na buněčnou membránu a po aktivaci světlem způsobují apoptotickou buněčnou smrt rakovinné buňky s vysokou účinností.

K. Kirakci^{*}, M. Kubáňová, T. Příbyl, M. Rumlová, J. Zelenka, T. Ruml, K. Lang^{*}: A Cell Membrane Targeting Molybdenum-Iodine Nanocluster: Rational Ligand Design toward Enhanced Photodynamic Activity. *Inorg. Chem.* **2022**, 61, 5076–5083.
DOI: 10.1021/acs.inorgchem.2c00040/D1

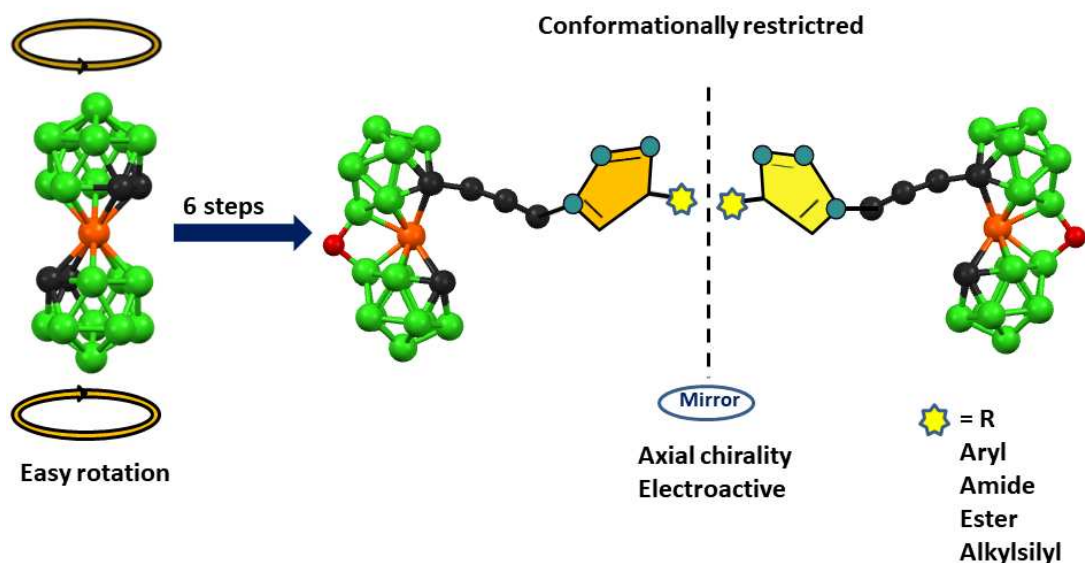
M. Koncošová, M. Rumlová, R. Mikyšková, M. Reiniš, J. Zelenka, T. Ruml, K. Kirakci^{*}, K. Lang: Avenue to X-ray-induced photodynamic therapy of prostatic carcinoma with octahedral molybdenum cluster nanoparticles. *J. Mater. Chem. B* **2022**, 10, 3303–3310.
DOI: 10.1039/D2TB00141A

Spolupracující subjekt:

Fakulta potravinářské a biochemické technologie, VŠCHT Praha

(2) Opticky a elektrochemicky aktivní sloučeniny s uzamčenou strukturou pro značení a výzkum biomolekul.

Studium struktury a vlastností biomolekul má v biochemii zásadní význam pro vývoj nových léčiv. Vědci z ÚACH vyvinuli reakční cestu vedoucí k nové třídě elektrochemicky a opticky aktivních molekul, které mají potenciál od sebe odlišit např. proteiny s různým prostorovým uspořádáním a ovlivňovat jejich funkci. Díky své elektroaktivitě také přináší možnost studia pomocí elektrochemických metod, což může být velmi silným nástrojem nejen v chemii, ale i v medicíně.



Schématické znázornění konformačního uzamčení struktury a připojení funkčních skupin ke skeletu kobalt bis(dicarbollid)u:

Obrázek naznačuje konformační uzamčení rotace ligandů ve skeletu pomocí kyslíkatého můstku mezi atomy boru a připojení funkčních skupin k jednomu či dvěma atomům uhlíku klastrového aniontu za vzniku chirální struktury. Přítomnost polárního můstku je zodpovědná za příznivé zvýšení elektrochemického potenciálu. Organické skupiny mohou být navázány přímo cykloadiční reakcí, nebo přes koncové skupiny přítomné na triazolovém kruhu.

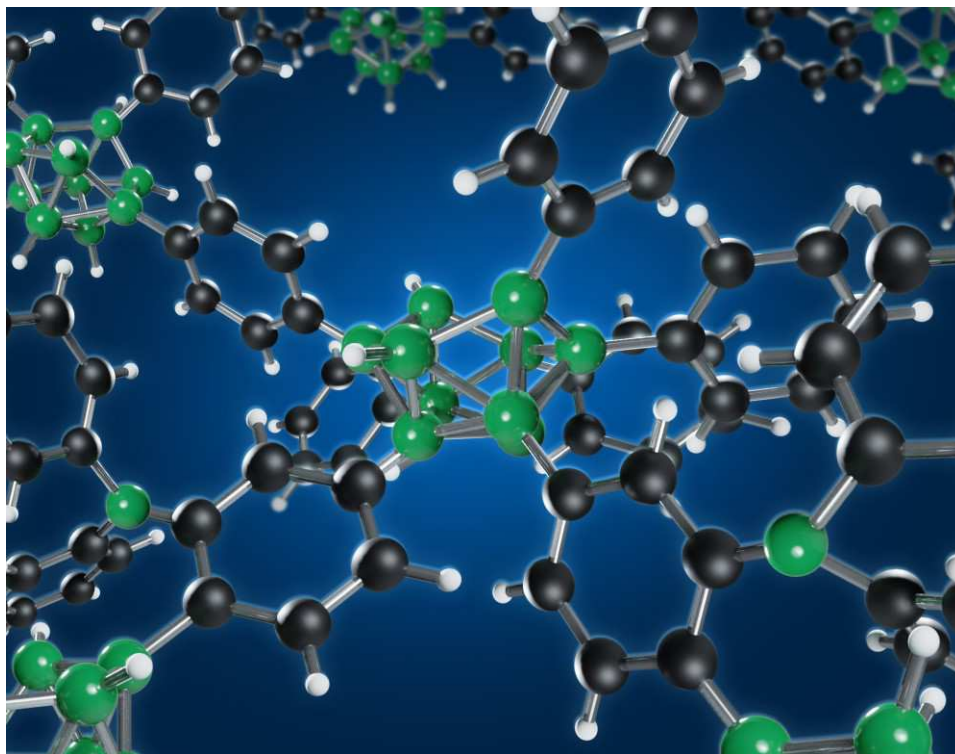
S. El Anwar; L. Pazderová; D. Baval; M. Bakardjiev; Z. Růžicková; O. Horáček; L. Fojt; R. Kučera; B. Grúner*: Structurally rigidified cobalt bis(dicarbollide) derivatives, a chiral platform for labelling of biomolecules and new materials. *Chemical Communications* **2022**, 58, 2572–2575/Q1.

Spolupracující subjekt:

Biofyzikální ústav AV ČR – elektrochemické studie; Katedra analytické chemie Farmaceutické fakulty UK, Hradec Králové – chirální separace.

(3) Aktivní boran – nový účinný porézní materiál pro odstraňování organických polutantů ze životního prostředí

Účinné odstranění odpadních látek ze životního prostředí je a bude vždy aktuálním a důležitým tématem. Běžně se pro tyto účely využívá tzv. aktivní uhlí, které zachycuje nečistoty do svých pórů. Na ÚACH jsme připravili alternativní porézní materiál pojmenovaný Aktivní boran s unikátní strukturou založenou na zesíťovaných boranových klastrech. Do dutin tohoto materiálu lze zachytit organické polutanty z vody. Svou účinností v mnoha ohledech převyšuje používané aktivní uhlí.



Schematické znázornění struktury Aktivního boranu:

Schematické znázornění Aktivního boranu. Boranové klastry (zeleně) jsou spojeny organickými můstky (černě), část atomů boru je také v trikoordinované formě, která má unikátní fyzikálně chemické vlastnosti.

D. Bůžek, K. Škoch, S. Ondrušová, M. Kloda, D. Bavoř, A. Mahun, L. Kobera, K. Lang, M. G. S. Londesborough*, J. Demel*, "Activated Borane" – A Porous Borane Cluster Network as an Effective Adsorbent for Removing Organic Pollutants, *Chem. Eur. J.* **2022**, e202201885.
DOI: 10.1002/chem.202201885

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. 2022 podíleli na zajištění přednášek, seminářů a vedení prací v pregraduálních programech Chemie, Geologie, Chemická a toxikologická analýza (PřF UK v Praze), Chemie (PedF UK v Praze), Ochrana přírody a krajiny (FŽP UJEP v Ústí nad Labem), Chemie a Analytická chemie životního prostředí a toxikologie (PřF UJEP v Ústí nad Labem), Materiály a technologie v dopravě (FSI UJEP v Ústí nad Labem) a Materiálové inženýrství (FSv ČVUT). Působí rovněž ve zkušebních a oborových komisích.

V průběhu letního semestru 2021/2022 a zimního semestru 2022/2023 přednášeli pracovníci ústavu v uvedených programech téměř 500 hodin.

Doktorské studijní programy:

Pracovníci ústavu se podíleli na výuce a vedení doktorských prací a působili v oborových radách a zkušebních komisích DSP Chemie (PřF UK), Chemie a chemické technologie (VŠCHT Praha), Chemie a technologie anorganických materiálů a Anorganické technologie (FCHT Univerzita Pardubice), Analytická chemie heterogenních procesů (PřF Ostravské univerzity), Environmentální chemie a technologie, Aplikované nanotechnologie a Materiálové vědy a analýza materiálů (FŽP, PřF a FSI Univerzity J. E. Purkyně v Ústí nad Labem).

V r. 2022 pracovalo pod supervizí ústavních školitelů 20 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: TA ČR (projekt TK03020188)

Dosažený výsledek: Byla ověřena reprodukovatelnost původní syntézy žáropevných materiálů se zvýšenou odolností vůči působení kyselin a nových materiálů 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 ověřena reprodukovatelnost syntéz funkcionalizovaných materiálů na bázi geopolymérů s vysokými obsahy práškových vápenců a dolomitů s uplatněním jako materiály pro sanace jaderných havárií.

3a-3) 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: V roce 2022 byla optimalizovaná příprava kompozitu zeolitu, modifikovaného exfoliovaným grafitem, grafen oxidem a iontovou kapalinou pro sorpci radionuklidů (především uranu) a těžkých kovů. Byla optimalizována příprava CPE elektrody a je podána patentová přihláška. Patent na CPE elektrodu pro detekci uranu zatím nebyl udělen.

3a-4) Solární dekontaminace povrchové vody pomocí plovoucího fotokatalyzátoru s 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. Vedle nosiče na bázi korku byly studovány plovoucí materiály na bázi silikátů a pěnového skla. Dosavadní výsledky ukazují, že vhodnými nosiči s ohledem na dlouhodobou stabilitu ve vodě jsou silikátové materiály a pěnové sklo. Jako vhodný fotokatalyzátor byl vybrán povrchově neupravený anatasový pigment Precheza AV01. Byla prokázána fotoaktivita připravených fotokatalyzátorů v plynném i kapalném prostředí (odstraňování NO_x a rozklad 4-chlorofenolu).

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

V r. 2022 byly uzavřeny významnější hospodářské smlouvy se 16 odběrateli a byly řešeny 3 projekty smluvního výzkumu.

Nejvýznamnější výsledky:

3b-1) Charakterizace nano TiO₂ vzorků pro nezávislé posouzení

Zadavatel: The Members of the Titanium Dioxide Manufacturers Association Sector Group (TDMA, Brusel)

Pomocí XRD, IČ a Ramanovy spektroskopie bylo prováděno stanovení chemického složení, fázového složení a amorfního podílu a nově i stanovení měrného povrchu neznámých modifikovaných TiO₂ vzorků.

Uplatnění: Výsledky jsou využity pro srovnání s ostatními institucemi na nezávislé posouzení v rámci EU.

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

Zadavatel: Quinta Analytica, s.r.o.

Anotace: V roce 2022 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-4) Anorganické nátěry pro úpravy oceli a hliníku

Zadavatel: UJEP 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-5) Stanovení velikosti povrchu a porozity nanokrystalických práškových materiálech na bázi ZnO

Zadavatel: Bochemie a.s.

Anotace: Metodou adsorpce a desorpce plynného dusíku při -196 °C byly získány 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.

3c) Další spolupráce v oblastech s aplikačním potenciálem

Výzkumný ústav pro hnědé uhlí a.s. – Vývoj materiálů zpracovávajících polétavé popílky a strusky.

Innovative Sensor Technology, s.r.o. – Vývoj nových senzorů.

3d) Patenty, užité vzory, vynálezy

V r. 2022 byl podán jeden patent a jeden užitečný vzor:

3d-1) Geopolymerní suspenze a způsob její přípravy

Kategorie: PV, PCT, zapsán pod číslem 309317

Patent chrání způsob přípravy geopolymerní suspenze pro nerozpustné tepelně a

korozně odolné povlaky na povrchy výrobků z Fe slitin pro využití při řízení tribologických vlastností povrchů kovů při vysokých teplotách.

3d-2) Obětní materiál pro jaderný průmysl

Kategorie: PUV, zapsán pod číslem 35963

Předložené technické řešení se týká složení univerzální anorganické matrice na geopolymerní bázi, do které je možné dispergovat vybraná prášková aditiva s využitím jako obětní materiály pro sanace havárií v jaderných zařízeních.

V r. 2022 bylo uzavřeno pět licenčních smluv.

4. Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště

4a) Projekty řešené v rámci mezinárodních vědeckých programů

4a-1) 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.

4a-2) Karboranovými ligandy chráněné kovové nanoklastry: nová třída materiálů s atomárním rozlišením (COST)

4a-3) Innovative Floating Photocatalyst with Specific Sorption Function (SEAEUROPEJFS)

4b) Konference s mezinárodní účastí, které ÚACH spolupřátal

V r. 2022 se ústav nebyl (spolu)pořadatelem 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.

4c-4) Téma: Projekt *Vortex4Fusion* (V4F). Konsorcium vědců z Finska (Tampere University, Tampere), České republiky (Ústav fyziky plazmatu, Praha a ÚACH), Německa (Leibniz Institute of Photonic Technology, Jena a Juelich Research Centre, Juelich) a Spojeného království (Modus Research and Innovation Ltd, Dundee).

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, Wroclaw University of Environmental and Life Sciences, Wroclaw, 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; partner: Center for Novel States of Complex Materials Research, Seoul National University, Seoul, Jižní Korea.

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 přechodných kovů pro teranostiku; partner: Institut des Sciences Chimiques de Rennes, Université de Rennes 1, Rennes, Francie.

Téma: Antibakteriální vrstvy na bázi kovových fotoaktivních klastrů; partneři: Universitat Politècnica de València-Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Valencia, Španělsko; Waseda University, Tokyo, Japonsko; Wilhelm-Ostwald-Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Leipzig, Leipzig, Německo; Université de Tours, Tours, Francie.

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: Fotofunkční metal-organické sítě na bázi lanthanoidů; partner: Faculty of Chemistry at Wroclaw University of Science and Technology, Wroclaw, Polsko.

Téma: Vývoj materiálů s vysokou adsorpční kapacitou pro odstraňování selenu z pitné vody; partner: CSIR-National Environmental Engineering Research Institute (NEERI), Nagpur, Indie.

Téma: Oxidy kovu modifikované nanočástice stříbra a jejich toxicita; partner: Vinca Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, Srbsko.

Téma: Fotokatalytické materiály TiO₂ a jejich EPR studie; partner: Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Bratislava, Slovensko.

Téma: MAX fáze jako nanokrystalické filmy a práškové polykrystalické materiály; partner: Dept. Physics, The University of Illinois at Chicago, Chicago, USA.

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 a experimentální verifikace víceřadových vazeb pomocí „high-angle X-ray“ difrakce; partner: Universität Bielefeld, Německo.

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

Téma: Využití objemných superchaotropických borátových a metallakarboranových aniontů v supramolekulární chemii a fyzikálně-chemických a biologických studiích; partner: Jacobs University Bremen, SRN.

Téma: Využití modifikovaných karboranových a metallakarboranových klastrů jako léčiva 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 Madras, Department of Chemistry, Tamil Nadu, Indie.

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

Téma: Halogenované heteroborany, jejich vznik, vazebné poměry a termodynamika jejich vzniku; partner: Universität Hohenheim, Německo.

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

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.

Téma: Vývoj říčních systémů; partner: Universita Bayreuth; Německo, Univerzita Leipzig, Německo; Universita Szeged, Maďarsko.

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.

6. Popularizační aktivity

ÚACH v roce 2022 uskutečnil řadu aktivit zaměřených na popularizaci vědy s cílem oslovit co nejširší spektrum zájemců:

Název akce: Otevření naučné stezky prof. Šimáně v Řeži

Popis aktivity: Dílničky pro děti – výroba molekul z bonbónů

Hlavní pořadatel: ÚJV Řež

Spolupořadatel: ÚACH AV ČR, v. v. i., Obec Husinec

Místo a datum konání akce: Řež, 5. 11. 2022

Název akce: Den otevřených dveří pro školy a pro veřejnost v rámci akce Týden AV ČR

Popis aktivity: Popularizační přednášky – ALMA, Pilotní centrum, Oddělení materiálové chemie; Úniková hra „Přísně tajný výzkum“

Hlavní pořadatel: AV ČR

Spolupořadatel: ÚACH AV ČR, v. v. i.

Místo a datum konání akce: Řež, 4. a 5. 11. 2022

Název akce: Veletrh vědy

Popis aktivity: Dílničky pro děti – výroba molekul z bonbónů, výroba slizu; Úniková hra „Přísně tajný výzkum“; Vzdělávací hra ve virtuální realitě „Vesmírný boj s meteority“; Přednášková místnost s postery, vzorky a videoprojekcí

Hlavní pořadatel: AV ČR

Spolupořadatel: ÚACH AV ČR, v. v. i.

Místo a datum konání akce: Praha, 2. 6 – 4. 6. 2022

Název akce: Exkurze pro řešitele soutěže KSICHT

Popis aktivity: Exkurze na ALMA a na vybraných přístrojích

Hlavní pořadatel: KSICHT (Korespondenční seminář inspirovaný chemickou tematikou)

Spolupořadatel: ÚACH AV ČR, v. v. i.

Místo a datum konání akce: Řež, 16. 6. 2022

Název akce: Den s experimentální fyzikou

Popis aktivity: Exkurze v Pilotním centru, v ALMA a v laboratoři termální analýzy

Hlavní pořadatel: FYKOS

Spolupořadatel: ÚACH AV ČR, v. v. i.

Místo a datum konání akce: Praha, 7. 11. 2022

Název akce: Miniaturní muzejní noc a den evropského dědictví

Popis aktivity: Komentované prohlídky výstavy miniatur, workshopy zaměřené na analýzu miniatur, astronomická pozorování

Hlavní pořadatel: AVU

Spolupořadatel: ÚACH AV ČR, v. v. i., oddělení ALMA

Místo a datum konání akce: Chomutov, 17. 9. 2022

Název akce: Vzestupy a pády portrétní miniatury

Popis aktivity: Výstava miniatur

Hlavní pořadatel: AVU

Spolupořadatel: ÚACH AV ČR, v. v. i., oddělení ALMA

Místo a datum konání akce: Chomutov, 25. 6. – 24. 9. 2022

Dále se zaměřujeme na propagaci vědy a výzkumu na sociálních sítích a na webových stránkách ústavu. Pravidelně také publikujeme v místním obecním zpravodaji v sekci „Z vědeckého údolí“ a řadě časopisů vydávaných AV ČR či jiných popularizačních časopisech určených pro širokou veřejnost. Několikrát za rok byl uspořádán seminář Science café, který je otevřen veřejnosti a na kterém vědečtí pracovníci v anglickém jazyce prezentují výsledky svého aktuálního výzkumu. Na naučné stezce v blízkosti ústavu byla rovněž umístěna velká informační tabule seznamující návštěvníky s hlavními výzkumnými tématy ÚACH AV ČR, v. v. i.

IV. Hodnocení další a jiné činnosti:

V rámci jiné činnosti byly v r. 2022 uzavřeny smlouvy v hodnotě 1126 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. 2022 neproběhla žádná kontrola.

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. 2022 s vyrovnaným rozpočtem.

Výše institucionální neinvestiční dotace poskytnuté z rozhodnutí zřizovatele v r. 2022 byla přibližně o 12,6 % vyšší než v r. 2021. Vedle institucionální dotace byla v r. 2022 část rozpočtu ústavu (cca 31 % neinvestičních nákladů) tvořena účelovými prostředky (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 (1 126 tis. Kč, viz výše) byl v r. 2022 v rámci hlavní činnosti realizován smluvní výzkum ve výši 1 672 tis. Kč. Výnosy z uzavřených licenčních smluv činily 528 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 2023 vycházejí z výzkumných záměrů ÚACH a z výsledků národních a mezinárodních projektů dosažených v předchozích letech, které mají přesah do roku 2023 a dále.

Budeme pokračovat v designu, přípravě a charakterizaci fotoaktivních komplexů přechodných kovů a (nano)materiálů z nich odvozených. Jedná se hlavně o komplexy porfyrinu a klastrové komplexy molybdenu, wolframu a rhenia, které budou použity samostatně nebo budou asociovány s biokompatibilními polymery, které by měly zaměřit zmíněné biomateriály na rakovinové buňky. Zmíněné biomateriály budeme využívat pro teranostiku, antimikrobiální fotodynamickou terapii a fotodynamickou terapii (PDT) a se zaměřením na PDT indukovanou rentgenovým zářením. Testování bude probíhat *in vitro* a v některých případech *in vivo* na myších modelech. Také budeme studovat kompozity klastrových komplexů s polovodičovými nanočásticemi a synergii jejich vzájemných interakcí na efektivitu fotodegradace organických polutantů a baktericidní/virucidní vlastnosti.

Budeme pokračovat ve studiu fosfinátových struktur MOFů, především jako protonových vodičů. Současně budeme detailně studovat protonové vodivosti porfyrinových zirkoničitých MOFů, které představují robustní matici s dostatečnou chemickou stabilitou, specifickým povrchem okolo 2000 m² g⁻¹ a velikostí pórů 2 nm, popř. 3,2 nm, což nám umožní modifikovat jejich vnitřní strukturu. Tyto struktury MOFů budou upravovány s cílem zvýšit mobilitu protonů v porézní struktuře několika dostupnými způsoby: inkluzí molekul kyselin a bází, postsyntetickou modifikací a zabudováním modifikovaných porfyrinových linkerů. U výsledných materiálů bude ve spolupráci s Univerzitou Pardubice určena jejich protonová vodivost za různé teploty a relativní vlhkosti a bude sledován vliv jednotlivých druhů modifikace na charakteristiky materiálů.

V roce 2023 se zaměříme na studium Aktivního boranu jako Lewisovsky kyselého heterogenního katalyzátoru. Zaměříme se na reakce s velkým společenským potenciálem, jako je například dehalogenace nebo deoxygenace organických molekul. V prvním případě budeme nejdříve testovat jednoduché organické

molekuly s cílem následně testovat pyrolytické produkty degradace plastů, v druhém případě bude finálním cílem deoxygenace cukrů jako potenciálního zdroje alkanů z biologických zdrojů. Také budeme studovat další možné aplikace Aktivního boranu, především formou spoluprací.

Nanokrystalické oxidy ceru jsou atraktivními nanomateriály, které se mohou uplatnit nejen v katalýze, ale jak ukazují poslední výzkumy, také v environmentálních nebo biomedicínských aplikacích. Proto budeme vyvíjet tzv. „green“ syntézy nanočástic CeO_2 , které mohou snížit materiálovou náročnost a potřebu toxických nebo problematických chemikálií a rozpouštědel a také poskytnout velmi málo toxické nanočástice pro využití v bioaplikacích. Dále se zaměříme na tzv. multi-enzymatickou aktivitu CeO_2 , zejména na studium parametrů, které jsou klíčové pro funkčnost a řízení těchto reakcí. Naše předběžné výsledky naznačují, že vybrané formy CeO_2 mohou hydrolyticky štěpit i jiné než fosfodiesterové vazby, např. vazby v amidech nebo karboxylátech, což by umožnilo zacílit náš výzkum i na další environmentálně i biologicky relevantní organické substráty. Konečně téma výzkumu antivirových a antibakteriálních látek na bázi oxidů ceru a jejich využití při odstraňování tzv. ARG (antibiotic resistance genes) budeme rozvíjet s našimi národními i mezinárodními partnery.

Toxicita nanomateriálů je aktuální téma, které bude nabývat na významu s rostoucím počtem jejich aplikací. Ve spolupráci s UJEP budeme dále rozvíjet studium toxicity námi připravovaných nanomateriálů pro savčí buňky, bakterie, řasy, bezobratlé, nebo ryby. Na základě výsledků těchto testů budeme modifikovat a vyvíjet syntézní postupy a nové materiály s minimálním negativním vlivem na životní prostředí.

Budeme pokračovat ve studiu boreniových solí s důrazem na vztah mezi jejich strukturou, reaktivitou a fotofyzikálními vlastnostmi. Díky Lewisovsky kyselému charakteru připravených látek budou tyto sloučeniny také studovány jako katalyzátory v reakcích typu metal free C-H aktivace, hydroborace či redukce CO_2 , případně jako molekulární senzory. Boreniové soli skýtají potenciál pro přípravu nenasycených sloučenin boru – boralkenů a heteroboralkenů. Přítomnost výrazně polarizované dvojné vazby otevírá možnosti pro jejich využití v cykloadičních reakcích s malými molekulami (CO_2 , ethylen...). Budeme studovat možnosti syntézy a reaktivity této skupiny unikátních sloučenin opět s přihlédnutím pro jejich využití jako katalyzátorů.

Budeme studovat dielektrické, magnetické a magnetoelektrické vlastnosti hexagonálních feritů strukturních typů X a U ve formě orientovaných keramik a vrstev s cílem dosažení magnetoelektrického jevu při pokojové teplotě. Budou připravovány tenké vrstvy vrstevnatých polovodičů $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dopovaných přechodnými kovy a studovaná korelace jejich transportních, magnetických a termoelektrických vlastností.

Budeme pokračovat rovněž ve studiu multivrstevnatých kompozitů na bázi MXene a Fe modifikovanými částicemi TiO_2 pro umělou fotosyntézu a dále vývojem homo- a heterogenních katalyzátorů cyklických monomerů (epoxidů) – vrstevnatých podvojných alkoxidů, iontových kapalin obsahujících kov. Nově se budeme zaměřovat na studium mineralizace nanoplastů pomocí fotokatalýzy a Fentovy reakce.

V oblasti aplikované anorganické chemie budeme pokračovat ve vývoji:

- (i) pokročilých konstrukčních materiálů pro jaderný průmysl a nízkoalkalických betonů pro jaderná úložiště,
 - (ii) systémů a zařízení pro reakční a suspenzní anorganický 3D tisk,
 - (iii) ekologických a žárovzdorných pojivových systémů z odpadních surovin jako náhrady cementových pojiv,
 - (iv) technologie výroby plovoucích fotokatalyzátorů se synergickou adsorpční schopností na bázi napěněného skla – fotoaktivní kompozit vodní sklo/TiO₂ a jeho aplikace pro mineralizaci organických polutantů.
- v) TiO₂ sorbentů a sorbentů na bázi Fe modifikovaného Zn(II) pro odstranění selenu v pitné vodě.

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 a studie fyzikálně-chemických vlastností, včetně studia reakčních mechanismů a energetické bilance.

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

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.

Budeme pokračovat ve studiu chiralit borových klastrových sloučenin a metod pro separaci enantiomerů s ohledem na vliv chiralit na biologické vlastnosti aktivních sloučenin a další aplikace.

Ve spolupráci s University of Hohenheim bude věnována pozornost vlastnostem originálních piktogena- a chalkogenaheteroboranů, včetně termodynamiky jejich vzniku; verifikace vzniku mono- a dikationtů založených na hexaboranech.

Vědci našeho týmu spoluzaložili konsorcium výzkumníků z Finska, České republiky, Německa a Spojeného království, které zahájilo ambiciózní projekt zaměřený na průlom v oblasti obnovitelné energie tím, že umožní dlouhodobý cíl jaderné fúze. Projekt *Vortex4Fusion* (V4F), podpořený grantem EU Pathfinders, si

klade za cíl prokázat princip nové technologie schopné bezprecedentní kontroly nad interakcemi světla se speciálně syntetizovanými boranovými terči.

V oboru environmentální geochemie budou pokračovat výzkumné aktivity zaměřené na zvýšené obsahy manganu a zinku v listech stromů v horských lesích, a to především v souvislosti s poškozením půd kyselými dešti nebo obecně imisemi z metalurgických a podobných výroby. Plánujeme rozšíření oblasti našeho zájmu ze středoevropských horských lesů i na severské nížinné (boreální) oblasti, které byly rovněž ovlivněny acidifikací půd kyselými dešti. K tomu byla navázána neformální spolupráce s univerzitou v Turku. Budeme také pokračovat v geochemickém mapování kontaminace půd vybraných území ústeckého kraje i hodnocením kontaminace půd celé ČR rizikovými prvky.

V oboru sedimentární geochemie se naskytla nečekaná možnost navázat na dlouholetý výzkum sedimentů mostecké pánve, vedený od roku 2008 ve spolupráci se Severočeskými doly, a.s. Provedeme chemistratigrafickou studii sedimentů, ukládaných během vzniku hlavní uhelné sloje, ovšem ve formě říčních sedimentů v oblasti Žatecka. Umožní to zřejmě poprvé určit délku časového období, po jaké existoval v mostecké pánvi uhlotvorný močál. Přesto, že se o odhad této doby pokoušelo několik generací geologů, je trvání uhlotvorby v pánvi dosud obestřeno tajemstvím a spekulacemi.

V oblasti ochrany kulturního dědictví bude pokračovat provenienční výzkum pigmentů pozdně-gotické malby, který se zaměří zejména na nalezení vhodného postupu odlišování pigmentových smaltů vyráběných z různých surovin v oblasti Krušnohoří a také odlišování minerálních azuritů z různých lokalit – význam mají zejména středověké lokality v Maďarsku, Francii a na Slovensku. V obou případech bude důležitá aplikace analýzy minoritních a stopových prvků, která obстоjí i při analýze drobných mikrovzorků z maleb. Testovány budou zejména LA-ICP-MS, SEM-WDS a také, pro určité kovy, i XRF. Bude probíhat sběr referenčních vzorků z historických lokalit a výroby, a to ve spolupráci s partnery v Sasku a na Slovensku. Měla by být zahájena i laboratorní replikace historické přípravy umělých uhličitanů mědi (typicky malachitu). Výzkum nově zahrne i studium pozdně-gotických polimentů pod zlacení se zaměřením na jejich odlišnosti technologické a materiálové. Klíčovým tématem experimentálního studia degradačních procesů zůstanou kovová mýdla s tím, že se více zaměří na praktické aspekty jejich rozpoznávání při běžném průzkumu výtvarných děl a také například na vliv složení používaných olejů na mechanismus jejich tvorby. Předpokládá se i intenzivní studium mýdel kademnatých v moderních malbách, nebo pokračování studia mýdel rtuťnatých, to vše i v rámci mezinárodních spoluprací. Nově výzkum degradací zahrne i degradační procesy pigmentů na bázi As, a to s cílem odlišit chování různých As sulfidů, přírodních a uměle vyráběných.

VIII. Aktivita v oblasti ochrany životního prostředí:

Jaderná bezpečnost. 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) a výrazně (až tisíckrát s ohledem na dobu nezbytného uložení a šedesátkrát z hlediska objemu) tak snížil objem radioaktivních odpadů ukládaných v povrchových i hlubinných úložištích. Dlouhodobě se podílíme na vývoji metod separace minoritních aktinoidů za použití řady vybraných činidel, pochopení stability ligandů, komplexů a rozpouštědel přítomných v systému vůči ionizujícímu záření a hledisek spojených s vývojem procesu a jeho bezpečností.

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

Udržitelnost. V době, kdy je potřeba diverzifikovat naše energetické zdroje stále naléhavější, je jaderná fúze zavedeným a slibným kandidátem jako výkonný zdroj bezuhlíkové, čisté a bezpečné energie. Společným konceptem budoucích fúzních elektráren je fúze deuteria a tritia, která je omezena buď magneticky nebo inerciálně. Tato konkrétní fúzní reakce ($^2\text{H} + ^3\text{H} \rightarrow ^4\text{He} + \text{n}$) byla upřednostňována díky svému relativně velkému průřezu při nízkých teplotách plazmatu. Během této reakce je však velká část uvolněné užitečné energie ve formě energetických neutronů, které mohou potenciálně aktivovat komoru fúzního reaktoru a jeho nejbližší okolí. To představuje při použití fúze deuterium-tritium značné technické překážky, které je třeba překonat, a bezpečnostní problémy, které je třeba vyřešit. Existuje však alternativa k fúzi deuterium-tritium, která v posledních letech získává na popularitě – aneutronická fúzní reakce. Tato skupina reakcí představuje čistý a bezpečný zdroj energie bez produkce radioaktivního ionizujícího záření. Mezi těmito aneutronickými reakcemi se nejslibnějším kandidátem jeví fúze protonů s atomy boru (reakce $\text{p}-^{11}\text{B}$: $\text{p} + ^{11}\text{B} \rightarrow 3\ ^4\text{He}$) vzhledem k relativní dostupnosti boru jako paliva a snadné manipulaci s ním. To vedlo v posledním desetiletí k řadě významných studií reakce $\text{p}-^{11}\text{B}$ a ke vzniku soukromých podniků, které chtějí tuto technologii využít (např. HB11 energy, australská společnost). Mezi hlavní nevyřešené otázky, které v současné době brání efektivnímu využití fúze $\text{p}-^{11}\text{B}$, patří (i) pochopení požadavků na laser nezbytný k vytvoření a udržení inerciálního zadržení paliva a zažehnutí reakce $\text{p}-^{11}\text{B}$ a (ii) lepší pochopení toho, které sloučeniny jsou ideálním palivem pro $\text{p}-^{11}\text{B}$ reakci. Náš interdisciplinární projekt zkoumá využití molekulárních borových hydridů (boranů) jako životaschopného ideálního paliva pro fúzi $\text{p}-^{11}\text{B}$. Tento projekt spojuje odborné znalosti ze dvou českých vědeckých institucí a několika institucí ze zahraničí a vytváří synergický a symbiotický most mezi anorganickou chemií (Ústav anorganické chemie, IIC) a fyzikou plazmatu (Ústav fyziky plazmatu, IPP). Průkopníkem studia fúzních reakcí by se tak mohl stát zcela nový přístup založený na klastrových boranových molekulách.

Po přijetí evropského projektu "Zelená dohoda pro Evropu" se zásadně změnil dosud neurčitý přístup některých cementáren v České republice k emisím CO_2 a cementárny se samy začínají iniciativně zajímat o případné náhrady portlandského cementu. V roce 2022 byla uzavřena licenční dohoda na způsob výroby "geopolymerně-pucolánových ekologických betonů". ÚACH se snaží v rámci svých možností přispět ke splnění závazků ČR při snižování emisí skleníkových plynů. Také se intenzivně věnujeme zpracování odpadních surovin

(např. popílky a strusky) s cílem maximálně nahradit ekologicky náročné portlandské cementy.

Voda. V mezinárodním projektu GreenWaterTech (Horizon 2020 Co-funds) se intenzivně zabýváme vývojem adsorbentů a fotokatalyzátorů na bázi oxidů kovů. 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 relativně levné metody přípravy funkčních nanomateriálů pro odstraňování a bezpečný rozklad polutantů nacházejících se ve vodách, se zaměřením na tzv. polutanty vzbuzující obavy (CEC – contaminants of emerging concerns). Jedná se např. o pesticidy, rezidua léčiv, endokrinní disruptory a biopolutanty (viry, bakterie, ARGs). Ve spolupráci s UJEP se nově zabýváme studiem toxicity námi vyvinutých nanomateriálů pro různé typy organismů (buňky, bakterie, řasy, ryby), abychom mohli posoudit a zdokumentovat dopady použití nanomateriálů na životní prostředí.

Také další témata aktuálně řešená na ÚACH, např. vývoj materiálů na bázi MOFů a Aktivního boranu, zaměřujeme na environmentální aplikace, zejména odstranění emergentních polutantů z vod. V tomto směru spolupracujeme s Fakultou životního prostředí UJEP. V této souvislosti také participujeme na organizaci krajského kola ekologické olympiády středoškolských studentů Ústeckého kraje.

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 kontaminantu.

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).

Zveřejnili jsme jasnou definici konfliktu mezi současnou snahou přestat zasahovat do říčních systémů inženýrsky (stabilizace břehů, regulace koryta), tj. ponechat je samovolnému vývoji, a faktem, že mnohé řeky byly vážně kontaminovány lidskou činností. Příkladem jsou přítoky Ohře v Bavorsku, silně kontaminované rtutí z historické chemické továrny. Nečinnost při správě těchto přítoků ohrožuje říční systém Ohře na české straně, protože břehová eroze dále mobilizuje historické znečištění, ačkoli okolí bývalé továrny již bylo revitalizováno. Práce konstatuje absenci legislativního rámce jak v rámci národním, tak EU, který by pokračování tohoto neblahého dědictví industrializace zastavil. Publikace je apelem ke změně náhledu na historicky kontaminované řeky ve střední i západní Evropě.

Samočistící materiály. 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 samočistící 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 Pragotharm, servis fasád s.r.o. a několika dalšími vědeckými

institucemi.

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.

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. 2022 bylo v ústavu zaměstnáno 86 fyzických osob (FO).

Struktura zaměstnanců ústavu

Počet zaměstnanců (FTE)		celkem	z toho muži	z toho ženy
		72,57	37,17	35,4
v tom	pracovníci ve výzkumných týmech	57,35	33,85	23,5
	administrativní pracovníci	8,6	0	8,6
	další pracovníci	6,62	3,32	3,3

Z uvedené tabulky vyplývá, že cca 79 % pracovní kapacity zaměstnanců ústavu tvořili pracovníci ve výzkumných týmech. Z těchto pracovníků (FTE) mělo 93 % ukončené VŠ vzdělání a z nich bylo 75 % vědeckých pracovníků (získali Ph.D. titul nebo jeho ekvivalent) a 10 % studentů doktorského studia.

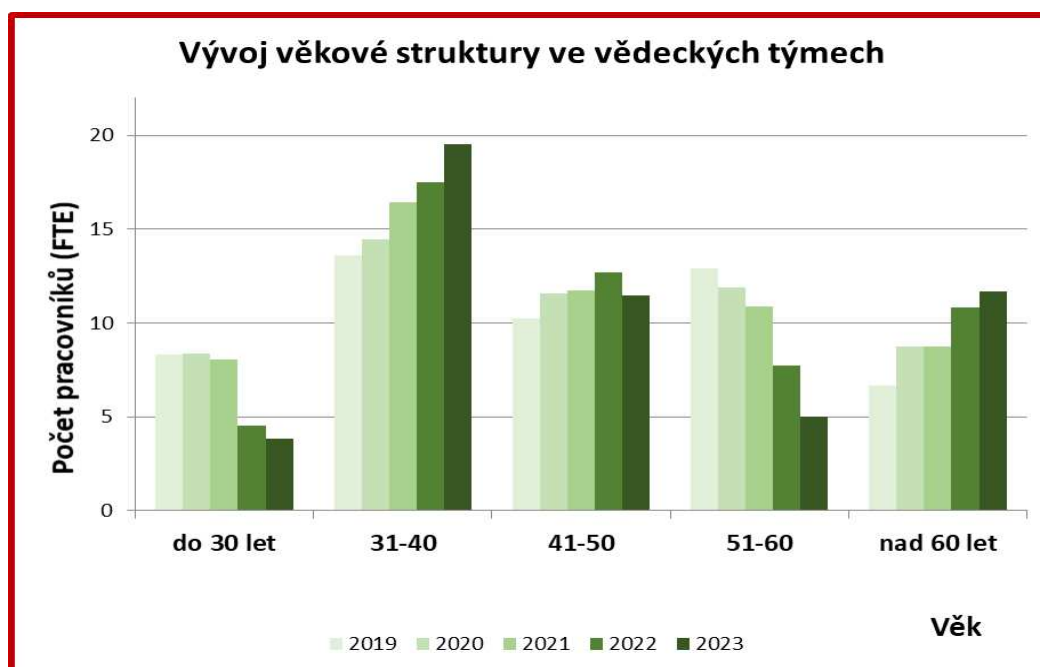
V roce 2022 pracovní poměr ukončilo 11 pracovníků, z nichž 8 pracovalo na částečný pracovní úvazek (0,2–0,5). Bylo přijato 6 pracovníků, z toho byli 4 zařazeni do výzkumných týmů, z nich 1 doktorand a 2 postdoktorandi. Při přijímání nových pracovníků je kladen důraz především na odbornost, vědeckou úroveň a perspektivu pracovníka.

Vedení ústavu věnuje setrvalou pozornost studentům DSP i pregraduálním studentům, jejichž práce probíhá pod supervizí ústavních školitelů. Studenti

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

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 2019–2022 s výhledem na r. 2023. Počet fyzických osob v nejnižších věkových kategoriích je ve skutečnosti výrazně vyšší, protože významný podíl těchto pracovníků tvoří studenti a maminky po návratu z mateřské nebo rodičovské dovolené, pracující na částečný úvazek. Průměrný věk pracovníků ve vědeckých útvarech v r. 2022 je ve srovnání s předchozím rokem stejný – 46 let.



Mzdové prostředky z dotace zřizovatele v r. 2022 činily cca 76 % z celkem vyplacených mzdových prostředků. Průměrná mzda byla ve výši 52 103 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. Aktivita v oblasti rovných příležitostí

Zavazujeme se podporovat rovnost žen a mužů v rámci akademické obce, bojovat s genderovými předsudky a vytvářet pracovní prostředí s rovnými podmínkami práce a kariérního růstu jak pro ženy, tak pro muže. Na 124. jednání Rady ústavu byla ustanovena Pracovní skupina pro rovnost žen a mužů ve složení Ing. Petra Ecorchard Ph.D., Ing. Kamil Lang, CSc., DSc., Ing. Silvie Švarcová, Ph.D. a RNDr. Jan Nekvinda, Ph.D., jejímž úkolem bylo vytvoření Plánu rovnosti žen a mužů Ústavu anorganické chemie AV ČR. Hlavním cílem Plánu je podpora opatření vedoucí ke zlepšování pracovních podmínek, rovnosti pohlaví a sociální spravedlnosti. Dokument je přístupný na webových stránkách ústavu (https://www.iic.cas.cz/wp-content/uploads/2022/07/GEP_UACH.pdf).

Byly vytvořeny pozice ombudsmanky (Ing. Petra Ecorchard Ph.D.) a ombudsmana (RNDr. Jan Nekvinda, Ph.D.), na něž se mohou pracující a studující v ÚACH obracet, pokud jsou na pracovišti vystaveni sexuálnímu obtěžování či nevhodnému sociálnímu chování (šikana, bossing, mobbing), nebo jsou jeho svědky. V roce 2022 proběhl ve spolupráci se Sociologickým ústavem AV ČR genderový audit. Součástí auditu byla analýza procesů, postupů a dokumentů instituce vztahující se k práci a kariéře perspektivou rovných příležitostí a dotazníkové šetření, jehož cílem bylo zmapovat v širší perspektivě pracovní prostředí a podmínky v ÚACH a potřeby zaměstnanců a zaměstnankyň. Dotazníkového šetření se účastnilo ca 75 % fyzických osob zaměstnaných či studujících v ÚACH. Dotazníky byly v české a

anglické verzi. Výsledky auditu (v české i anglické verzi) jsou uveřejněny na interním webu ústavu a budou podkladem pro aktualizaci Plánu rovnosti žen a mužů Ústavu anorganické chemie AV ČR.

Zastoupení mužů a žen k 31.12. 2022

	Muži	Ženy
Kvalifikační stupeň		
Odborný pracovník výzkumu a vývoje	4	6
Doktorand	4	4
Postdoktorand	9	8
Vědecký asistent	1	1
Vědecký pracovník	12	5
Vedoucí vědecký pracovník	7	0
Ostatní pracovníci	6	18
Zastoupení mužů a žen při podávání grantových návrhů	21	5
Zastoupení mužů a žen v Radě ústavu	7	4
Zastoupení mužů a žen v Dozorčí radě	5	0
Zastoupení mužů a žen ve vedoucích pozicích	5	2
Zastoupení mužů a žen, ukončení pracovního poměru	8	3



Výroční zpráva o poskytování informací za rok 2022

**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

^{**}) 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 BETONEXT s.r.o., která dlouhodobě spolufinancuje úhradu nákladů souvisejících s vývojem nových materiálů.
2. Výhradní licence byly poskytnuty společnosti New Human Solution, s.r.o. (Z. a A. Čermákovi), která dlouhodobě spolufinancuje úhradu nákladů souvisejících s přípravou funkčních nátěrů ocelových povrchů vhodných pro úpravu a stabilizaci vody.

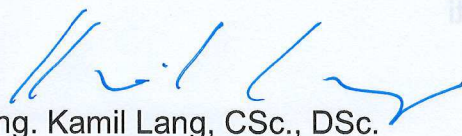
7. Počet stížností podaných podle § 16a zákona č. 106/1999 Sb., důvody jejich podání a stručný popis způsobu jejich vyřízení

Nebyla podána žádná stížnost.

8. Další informace vztahující se k uplatňování tohoto zákona
0

Výroční zpráva ÚACH o poskytování informací podle zákona je začleněna do Výroční zprávy o činnosti a hospodaření ÚACH za rok 2022 jako její samostatná část s názvem „Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb. o svobodném přístupu k informacím“.

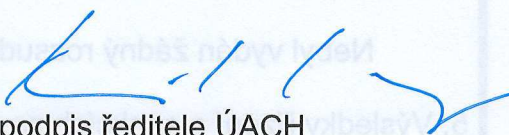
14. ledna 2023


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 ÚACH

Přílohou výroční zprávy je účetní závěrka a zpráva o jejím auditu