

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

IČO: 61388980

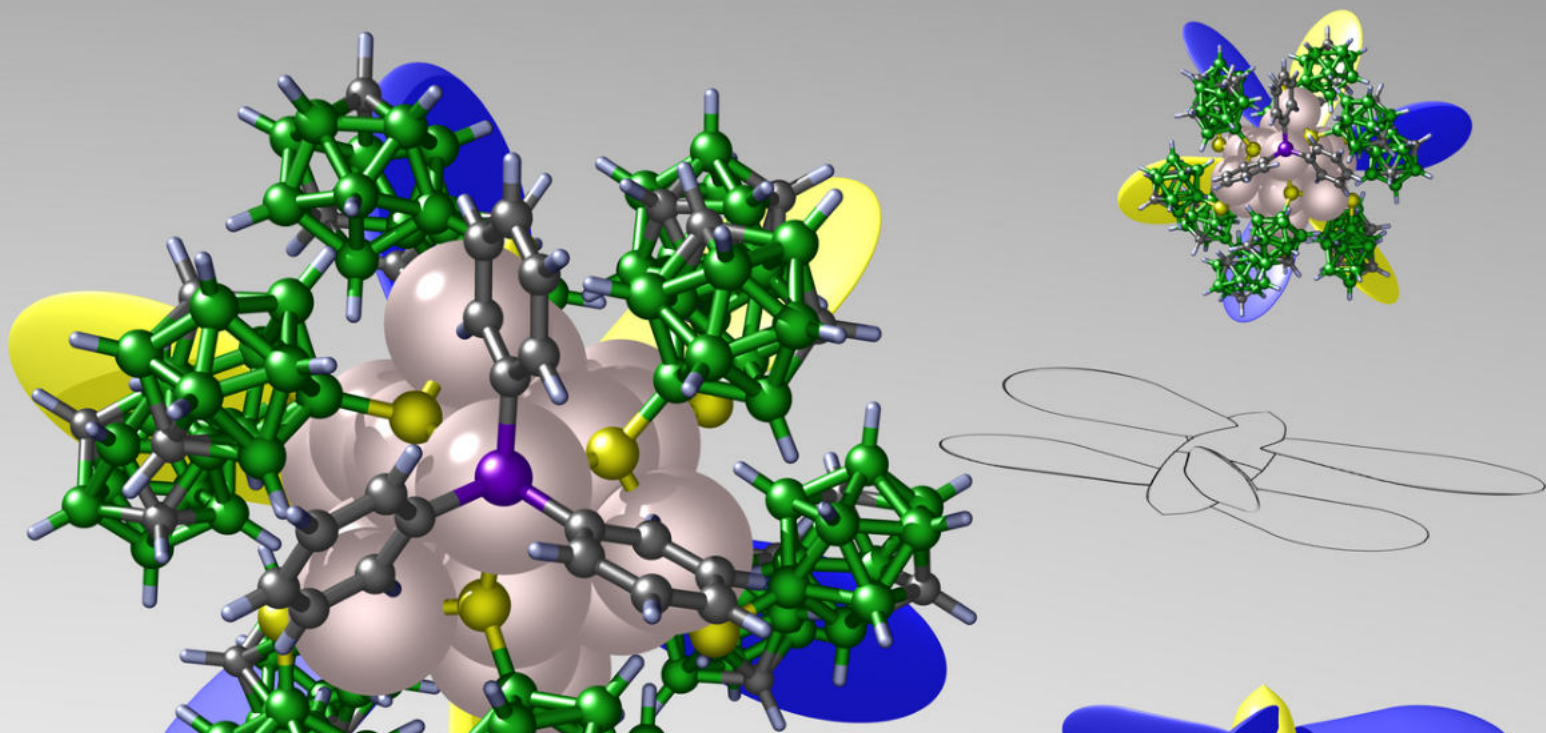
Sídlo: Husinec-Řež

Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2024

Dozorčí radou pracoviště schválena dne: 9. 6. 2025

Radou pracoviště projednána dne: 28. 5. 2025

V Řeži dne: 13. 3. 2025



Obsah

I.	Úvodní slovo ředitele	3
II.	Orgány ústavu	4
III.	Změny zřizovací listiny	9
IV.	Hlavní činnost	10
V.	Další činnost	38
VI.	Nápravná opatření v hospodaření	38
VII.	Hospodářské výsledky a vývoj	38
VIII.	Budoucí výzkum a cíle ústavu	39
IX.	Ochrana životního prostředí	48
X.	Pracovněprávní vztahy	52
XI.	Rovné příležitosti	55
XII.	Přístup k informacím	56
XIII.	Přílohy	57

I. Úvodní slovo ředitele

Vážené kolegyně, vážení kolegové,

s potěšením Vám předkládáme výroční zprávu o činnosti a hospodaření našeho Ústavu za rok 2024. Z přehledu vyplývá, že uplynulý rok byl obdobím intenzivní vědecké práce, rozvoje stávajících výzkumných témat, vzniku nových směrů a posilování mezinárodních spoluprací.

Naše projekty se úspěšně prosadily i v silné konkurenci Grantové agentury České republiky, kde jsme dosáhli nadprůměrné úspěšnosti – téměř 37 % – při získávání finanční podpory. Aktivně jsme se podíleli na řešení národních i mezinárodních projektů, včetně výzkumné infrastruktury NanoEnviCz, publikovali výsledky v prestižních vědeckých časopisech a účastnili se odborných konferencí, čímž jsme dále upevnili renomé našeho Ústavu. Zároveň se profilujeme jako spolehlivý partner pro komerční subjekty, kterým nabízíme odborné know-how, kvalitní zázemí a flexibilní přístup při řešení konkrétních výzev.

Velmi si vážím Vaší usilovné práce ve všech profilových oblastech našeho Ústavu, které zahrnují materiálovou chemii, pokročilou chemii boru, luminiscenční molekuly a materiály, ochranu kulturního dědictví, vývoj anorganických materiálů pro 3D tisk nebo mapování kontaminace půd rizikovými prvky. Těší mne Vaše pedagogická činnost a rostoucí zapojení mladých vědců a doktorandů.

Rok 2024 byl rovněž obdobím rozšíření našeho přístrojového vybavení, což významně přispívá k udržení vysoké úrovně naší vědecké práce.

Dovolte mi na tomto místě Vám poděkovat za Vaše nasazení, tvořivost a profesionalitu.

Přeji Vám úspěšný rok 2025 – nejen na poli profesním, ale i v osobním životě.



Ing. Kamil Lang, CSc. DSc.
ředitel



II. Orgány ústavu

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 (ÚACH)
(jmenován s účinností od: 1. 8. 2023)

Rada pracoviště: (pro období 1. 1. 2022 - 31. 12. 2026)

Předsedkyně: Ing. Silvie Švarcová, Ph.D., ÚACH

Místopředsedkyně: Ing. Petra Ecorchard, Ph.D., ÚACH

Členové:

RNDr. Dr. Petr Bezdička, ÚACH

RNDr. Michal Dušek, CSc., FzÚ AV ČR

Ing. Jiří Henych, Ph.D., ÚACH

Mgr. David Hradil, Ph.D., ÚACH

Mgr. Jan Hynek, Ph.D., ÚACH

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

Ing. Kamil Lang, CSc., DSc., ÚACH

RNDr. Jiří Plocek, Ph.D., ÚACH

Ing. Zdeňka Sedláková, CSc., ÚMCH AV ČR

prof. Dr. Ing. David Sedmidubský, VŠCHT Praha

Dozorčí rada: (pro období 1. 5. 2022 - 30. 4. 2027)

Předseda: RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc., AR AV ČR

Místopředseda: RNDr. Bohumír Grüner, CSc., ÚACH

Členové:

Ing. Jiří Plešek, CSc. jmenován od 8. 2. 2023, ÚT AV ČR

Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, VŠCHT Praha

Dr. Ing. Jiří Kotek, dr.h.c., ÚMCH AV ČR



b) Změny ve složení orgánů:

V roce 2024 neproběhla ve složení orgánů žádná změna.

c) Informace o činnosti orgánů:

Ředitel:

V roce 2024 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 2023-2027,
- 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 roku 2024 bylo vydáno osm interních předpisů (IP):

- IP č. 125 - O poskytování peněžitého příspěvku na stravování zaměstnanců,
- IP č. 126 - Jednací řád - Rady Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i.,
- IP č. 127 - Organizační řád - Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i.,
- IP č. 128 - Volební řád - pro volby v Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i.,
- IP č. 129 - Pravidla pro hospodaření s fondy,
- IP č. 130 - Použití prostředků Sociálního fondu,
- IP č. 131 - Etický kodex vědecko-výzkumné činnosti v Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i. (Code of Ethics for Scientific Research of the Institute of Inorganic Chemistry),
- IP č. 132 - Definice a jednací řád Etické komise Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i.

Byl vydán Příkaz ředitele k provedení inventarizace hospodářských prostředků v roce 2024 a Směrnice ředitele pro účely poskytování cestovních náhrad v roce 2024 a Metodika vykazování skutečných nepřímých nákladů projektů v roce 2024.

V závěru roku 2024 byla vyhodnocena a individuálně oceněna publikační aktivita výzkumných pracovníků. Byla rovněž provedena analýza věkové struktury pracovníků ústavu, posouzeno personální zabezpečení řešení jednotlivých výzkumných úkolů a přijata potřebná opatření pro r. 2025.

Přístrojové vybavení ústavu bylo doplněno o vakuový FTIR spektrometr pro in situ/operando měření, cena 6 709 450 Kč včetně DPH, pro oddělení Materiálové chemie. Menší investice zahrnovaly FTIR spektrometr s příslušenstvím (3 823 600 Kč včetně DPH), vertikální generátor par s kontrolou vlhkosti (42 266,51 EUR včetně DPH), digestoře, Rotavapor, ponorné sondy pro měření zeta potenciálu a cooler. S přihlédnutím k požadavkům jednotlivých oddělení a laboratoří byl ve spolupráci s Technickou komisí vypracován plán nákladných oprav, stavebních úprav a akvizicí přístrojového vybavení pro další období.

V roce 2024 bylo řešeno 18 projektů vědy a výzkumu (VaV) v programech GA ČR (9), TA ČR (2), MŠMT (3), MŠMT - EIG CONCERT Japan, spolupráce ČR-Francie-Španělsko-Japonsko, Horizont (3) a další projekty byly podporovány zřizovatelem (např. Prémie Lumina Quaeruntur, Strategie AV 21, Mobility plus, Program rozvoje aplikací a komercializace AV ČR, Researchers at risk fellowships). Účelové prostředky plynoucí z podpory zmíněných poskytovatelů do rozpočtu představovaly cca 32 % neinvestičních nákladů ústavu. Mzdové prostředky vyplacené z účelových dotací činily cca 21 %.

Rada pracoviště:

V roce 2024 se uskutečnilo 12 jednání Rady ÚACH AV ČR, v. v. i.:

141. jednání, 9. 1. – 11. 1. 2024, per rollam

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu M. Motlochové do grantové soutěže GAČR.

142. jednání, 25. 1. – 30. 1. 2024, per rollam

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu J. Henycha do grantové soutěže Advanced Biomaterials for the Health Care (IA) HORIZON-CL4-2024 RESILIENCE-01-36

143. jednání, 22. 3. – 26. 3. 2024, per rollam

- Rada projednala návrhy přihlášek do grantové soutěže GAČR 2024, v nichž pracovníci ústavu figurují jako navrhovatelé či spolunavrhovatelé.
- Rada vyjádřila podporu k vytvoření neformální komunikační platformy zástupců rad pracovišť za účelem zlepšení vzájemné informovanosti mezi radami institucí, k výměně zkušeností k fungování rad v nové legislativní situaci, kdy byly novelou zákona č. 341 o v.v.i. omezeny pravomoci rad, a k diskuzi o podnětech pro Akademický sněm a Akademickou radu.

144. jednání, 23. 5. 2024

- Rada projednala a schválila návrhy interních předpisů č. 126 Jednací řád, č. 127 Organizační řád a č. 128 Volební řád pro volby v Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i., aby byly v souladu s novelou zákona č. 341/2005 Sb. o veřejných výzkumných institucích.
- Rada projednala Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ústavu za rok 2023, zprávu auditora o ověření účetní závěrky za rok 2023, návrh rozpočtu výnosů a nákladů na rok 2024 a střednědobý finanční výhled 2025-2026.
- Rada se zabývala přípravou na hodnocení ústavu za období 2020-2024.
- Rada dále projednala a doporučila podání návrhu projektu P. Ecorchard do grantové soutěže TAČR, návrhů projektů S. Bakardjiev, J. Macháčka a T. Bašeho do programu AV ČR Mobility Plus a návrhu projektu Z. Černého do programu AV ČR - PRAK.

145. jednání, 4. 6. – 6. 6. 2024, per rollam

- Rada projednala a doporučila podání návrhu J. Henycha do grantové soutěže TAČR, návrhů projektů P. Ecorchard a D. Smržové do programu AV ČR Mobility Plus a návrhu projektu M. Litecké do grantové soutěže I-E II, podprogram INTER-ACTION, LUAUS25.
- Rada projednala a schválila interní předpisy č. 129 - Pravidla pro hospodaření s fondy a č. 130 - Použití prostředků Sociálního fondu.

146. jednání, 24. – 26. 6. 2024, per rollam

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu T. Bašeho do grantové soutěže MŠMT – INTER-ACTION, LUAUS25.

147. jednání, 9. – 11. 9. 2024, per rollam

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu J. Henycha do grantové soutěže EU Commission – Programme for the Environment and Climate Action (LIFE).

148. jednání, 18. – 22. 10. 2024, per rollam

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu J. Henycha do grantové soutěže European Defence Fund.

149. jednání, 4. – 7. 11. 2024, per rollam

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu J. Henycha do grantové soutěže European Union Co-Fund.

150. jednání, 12. – 18. 11. 2024, per rollam

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu K. Kiracki do grantové soutěže HORIZON-MSCA-2024-DN-01-01.

151. jednání, 2. 12. 2024

- Rada vyslechla informaci o připravovaném programu excelence AV ČR – Akademie budoucnosti.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu B. Grünera do grantové soutěže LA Project Opus -26-19608L NCN-GA CR.
- Rada projednala návrh ředitele na aktualizaci formuláře pro projednávání návrhů projektů Radou ústavu.
- Rada projednala a schválila interní předpis č. 131 - Etický kodex vědecko-výzkumné činnosti v ÚACH AV ČR, v. v. i. (aktualizace dle nového znění Etického kodexu AV ČR) a interní předpis č. 132 - Definice a jednací řád Etické komise ÚACH.
- Rada se zabývala stavem přípravy na hodnocení výzkumné a odborné činnosti pracovišť AV ČR za období 2020-2024.
- Předsedkyně Atestační komise P. Ecorchard informovala o proběhlém atestačním řízení.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu M. Motlochové do Programu rozvoje aplikací a komercializace AV ČR (PRAK).
- Rada diskutovala negativní dopad připravovaného vysokoškolského zákona na možnost pracovišť AV ČR podílet se na školení studentů/studentek doktorského studia.
- Rada vyslechla informaci o možnosti vzdálených přístupů k počítačům (včetně počítačů řídicích přístrojů) v souvislosti s aplikací směrnice NIS2.

152. jednání, 16. – 17. 12. 2024, per rollam

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu J. Plocka do Programu rozvoje aplikací a komercializace AV ČR (PRAK).

Dozorčí rada:

V roce 2024 se uskutečnila 2 jednání Dozorčí rady ÚACH AV ČR, v. v. i.:

24. jednání, 10. 6. 2024

Dozorčí rada:

- projednala a schválila Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ÚACH AV ČR, v. v. i.; v roce 2023 bez připomínek,
- vzala na vědomí zprávu nezávislého auditora o ověření účetní závěrky za rok 2023 bez připomínek,
- projednala návrh rozpočtu nákladů a výnosů na rok 2024 a střednědobý výhled 2025-2026,
- určila firmu ACONTIP s. r. o. zapsanou v obchodním rejstříku vedeném Městským soudem v Praze, oddíl C, vložka 209997 (IČ 01709585) auditorem na rok 2024,
- vzala na vědomí přehled právních jednání nad 50 tis. Kč a konstatovala, že všechny smlouvy byly řádně zveřejněny,
- schválila aktualizovaný jednací řád dozorčí rady ústavu,
- schválila zprávu o činnosti Dozorčí rady za rok 2023,
- zhodnotila manažerské schopnosti ředitele ústavu Ing. Kamila Langa, CSc., DSc.

25. jednání, 4. 12 2024

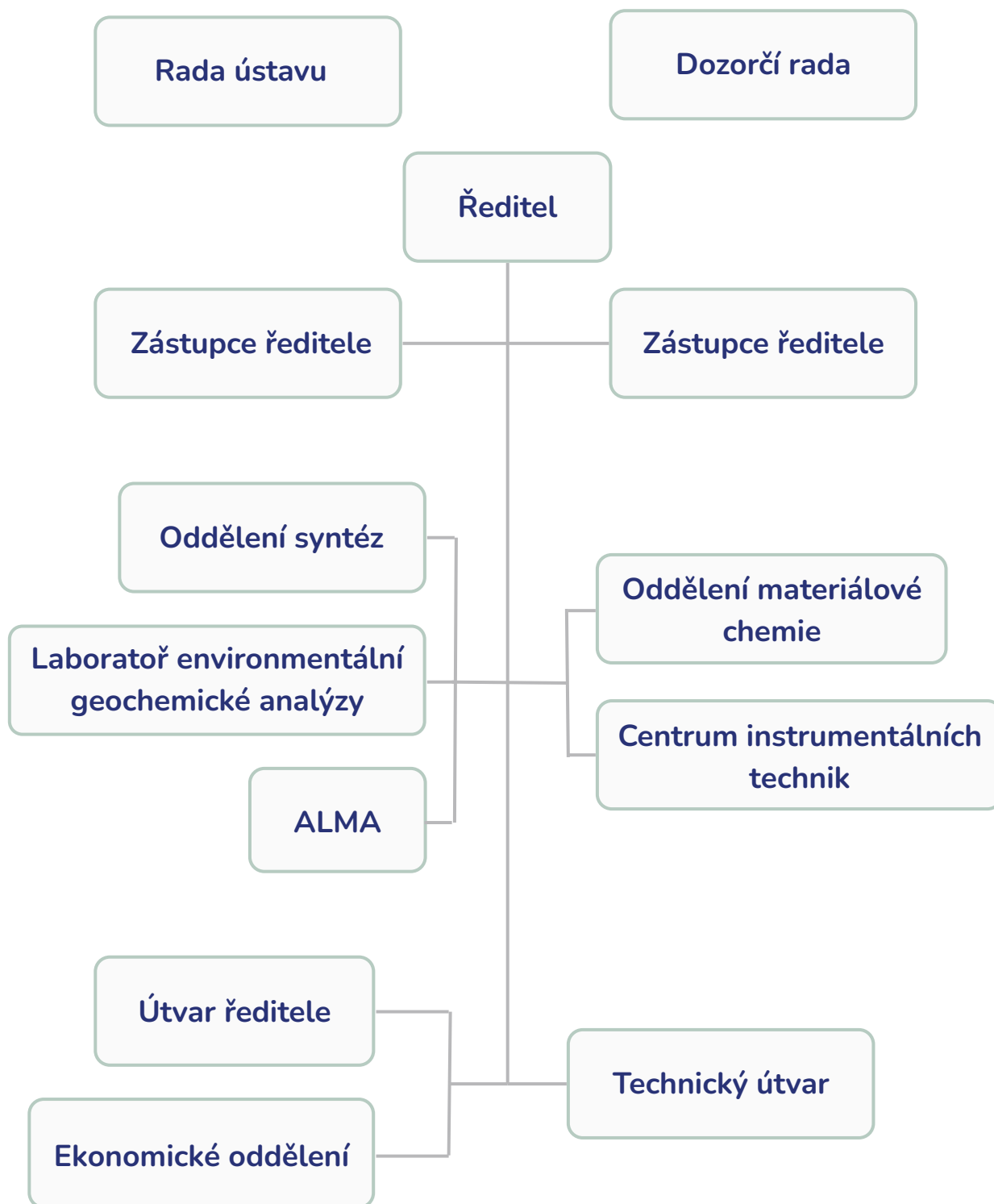
Dozorčí rada:

- vyslechla zprávu ředitele o hospodaření ÚACH v roce 2024 a komentář k větším výdajům (oprava následků havárie vody, přípravné práce související s budováním fotovoltaické elektrárny, přístrojové investice) a seznámila se s finančním plánem na rok 2025,
- ředitel dále podal přehled nově podaných grantů GAČR, TAČR, Horizont, PRAK a Marie Skłodowska Curie Doctoral Network a dalších finančních zdrojů pro rok 2025 (programy excelence a Strategie AV). Plánované činnosti pro rok 2025 jsou: dokončení stavby fotovoltaické elektrárny a uzavření nové smlouvy s ÚJV a.s. o areálových službách,
- vzala na vědomí, že v roce 2024 neproběhly žádné veřejnosprávní kontroly,
- diskutovala otázky provozu areálu a proporcionality poplatků, údržby a správy, resp. možnosti nových budov v rámci AV a možnosti dotace AV na instalaci fotovoltaiky.

III. Změny zřizovací listiny

V roce 2024 nedošlo ke změně zřizovací listiny.

Organizační řád



ALMA - Akademická laboratoř materiálového průzkumu malířských děl

IV. Hlavní činnost

01

Vědecká činnost ústavu a uplatnění jejích výsledků

1a) Stručná charakteristika vědecké činnosti

V roce 2024 byla výzkumná činnost ústavu zaměřena na následující oblasti:

- Chemie boru
- Fotoaktivní anorganické molekuly a materiály
- Pokročilé 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 površích,
- teoretická chemie polyhedrálních boranů,
- Aktivovaný 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 materiály pro životní prostředí

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

- reaktivní sorpční materiály,
- koordinační polymery,
- anorganické ion-exchange materiály,
- 2D (nano)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) Nejdůležitější výsledky vědecké činnosti a jejich aplikace

Nejvýznamnější výsledky byly v roce 2024 získány především v oblastech materiálové chemie a chemie borových sloučenin.

Fotodynamické a radiodynamické Mo₆ biomateriály

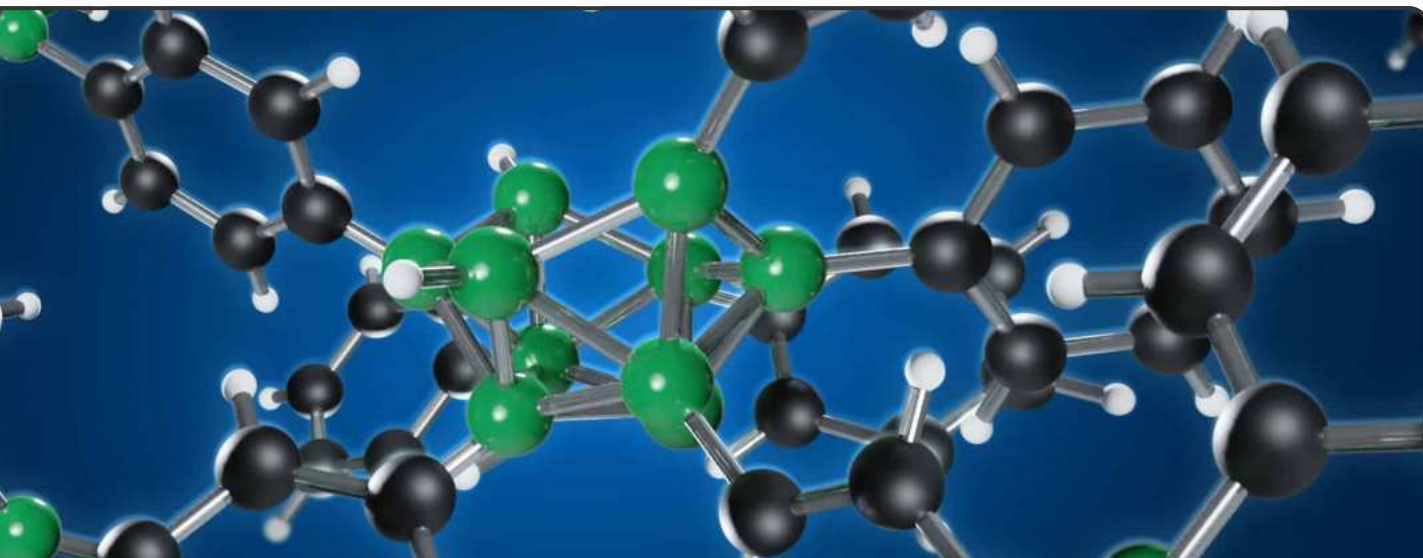
V oblasti materiálové chemie jsme se zaměřili na vývoj oktaedrických klastrových komplexů molybdenu (Mo₆) s fotodynamickými a radiodynamickými vlastnostmi. Nově připravené PEGylované Mo₆ biomateriály byly připraveny metodami click chemie. Ve vodném prostředí se vytvářely nanočástice, které se koncentrují v buňkách a produkují singletový kyslík. Tento biomateriál má výrazné fototoxické a radiotoxické vlivy na prostatické rakovinové buňky, např. výrazně zvyšuje radiotoxické účinky rentgenového záření na tyto buňky s faktorem zvyšujícím dávku přibližně 1,9. To znamená, že potřebná dávka k dosažení nutného antiproliferačního účinku je významně nižší než je tomu v nepřítomnosti Mo₆ biomateriálu. Zjištění, že připravený biomateriál nemá akutní toxické účinky v dávkách až 2 mg na myš (~0,1 g kg⁻¹) bylo získáno ve spolupráci s Ústavem molekulární genetiky AV ČR. Prokázali jsme relevanci Mo₆ biomateriálů pro vývoj nových radiosensitizačních systémů. S ohledem na variabilitu složení ligandů Mo₆, naše nové poznatky mohou vést k jejich biomedicínským aplikacím, např. pro radiodynamickou terapii rakoviny.

Kamil Lang, Kaplan Kirakci

Aktivní boran

Prokázali jsme, že námi vyvinutý Aktivní Boran může sloužit nejen jako heterogenní kyselý katalyzátor na deoxygenace a hydrosilylace, ale že je také aktivní pro dehalogenaci modelových substrátů. Tato úvodní práce, publikovaná v Catal. Sci. Technol, slouží jako proof of concept pro optimalizaci struktury katalyzátoru za účelem vyšší aktivity pro použití na defluorace již konkrétních perzistentních polutantů. Tato práce je naplánována na 2025. Dále jsme připravili Aktivní Boran z nido a arachno klastrů, které obsahují dusík. Tyto materiály byly testovány jako nové materiály pro superkondenzátory ve spolupráci s partnery z National Central University, Taiwan.

Jan Demel



MOFy – stabilita a protonová vodivost

Zabývali jsme se také studiem stability zirkoničitých karboxylátových MOFů (metal-organic framework) ve vodném prostředí o různém pH. Součástí studie byly 4 modelové materiály s různou velikostí pórů, konektivitou Zr_6 klastrů a vazností organických linkerů. Byly zjištěny zásadní odlišnosti ve stabilitě zkoumaných materiálů. Nízká konektivita klastrů vede k prokazatelně nižší stabilitě materiálu, jinak je ovšem stabilita výrazněji ovlivněna vazností ligandů. Materiály obsahující čtyřvazné ligandy byly stabilnější než materiály založené na dvou-, popř. třívazných ligandech. Zároveň byl prokázán výrazný vliv přítomnosti monokarboxylových ligandů vázaných na Zr_6 klastrech na stabilitu i katalytické vlastnosti materiálů. V návaznosti na provedenou studii hydrolytické stability MOFů byla provedena analogická studie stability v prostředí zvýšené vzdušné vlhkosti a jejího vlivu na protonovou vodivost materiálů. Bylo zjištěno, že ačkoliv zirkoničité MOFy založené na čtyřvazných porfyrinových ligandech vykazují vysokou stabilitu ve vodném prostředí, při vzdušné vlhkosti 75 %, popř. 92 % podléhají rychlé degradaci struktury a ztrátě porozity. Postsyntetická modifikace spočívající v substituci Zr_6 klastrů hydrofobními difenylfosfinátovými ligandy vede ke zvýšení stability materiálů, avšak zavedení hydrofilních molekul zvyšujících protonovou vodivost (např. imidazol) do pórů materiálů stabilitu naopak snižuje. Výsledné amorfní produkty stále vykazují hodnoty protonové vodivosti typické pro karboxylátové MOFy, avšak na rozdíl od stabilnějších materiálů zavedení hydrofilních molekul nepřináší výrazné zlepšení vlastností. Relativní nestabilita porfyrinových zirkoničitých MOFů při vyšší vlhkosti je pravděpodobně způsobena součinností hydrolýzy a kapilárních sil kapiček vody kondenzujících v neobvykle velkých pórech těchto materiálů (2,0, resp. 3,2 nm).

Jan Demel, Jan Hynek, Matouš Kloda, Daniel Bůžek

Kationtové sloučeniny boru – kyselost, luminiscence

Připravili jsme nový typ kationtových sloučenin boru a zevrubně jsme popsali vliv struktury na jejich výslednou (super)kyselost. Řada z připravených sloučenin vykazuje luminiscenční vlastnosti, na základě získaných dat jsme systém optimalizovali a připravili látky vykazující zeleno-žlutou luminiscenci s vysokým kvantovým výtěžkem až 93 %. Podnikli jsme první kroky v testování katalytické aktivity připravených látek a objevili jsme, že velmi efektivně katalyzují homocouplingové reakce diazo-sloučenin za vzniku různých derivátů tetraarylethenu.

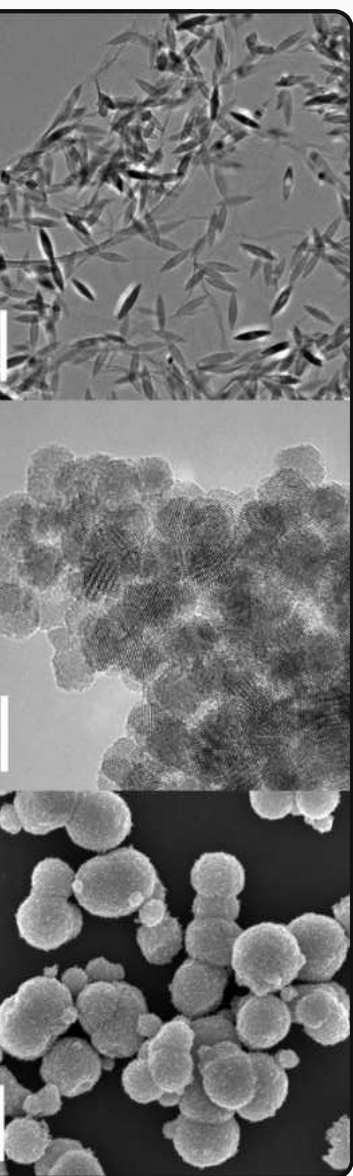
Karel Škoch

Crystalline Sponge & simulace

Podařilo se nám získat nejen první výsledky, ale také financování GAČR zaměřené na metodu krystalické houby, tzv. Crystalline Sponge Method. Ve spolupráci s Matematicko-fyzikální fakultou UK a Fyzikálním ústavem AV ČR jsme za použití molekulových dynamických výpočtů nasimulovali interakci krystalické houby s adsorbovaným boranovým klastrem. Očekáváme publikaci prvních výsledků v roce 2025.

Miroslava Litecká

CeO₂ nanomateriály – rozklad léčiv a polutantů



Ve výzkumu povrchové reaktivity nanostrukturních oxidů (zejména CeO₂) jsme poprvé experimentálně potvrdili, že vybrané CeO₂ nanostruktury jsou schopné spontánně hydrolyticky štěpit vazby v sulfonamidových léčivech. Zjistili jsme tak, že dnes již dobře známá výjimečná reaktivita nanoceria není limitována na defosforylaci biologicky či environmentálně významných fosfoesterů, zahrnujících široké spektrum látek od pesticidů, chemických bojových látek po nukleotidy. Spontánní rozklad sulfonamidových antibiotik na povrchu CeO₂ může být atraktivní cestou, jak využít nanomateriály k rozkladu a odstranění léčiv či jiných polutantů ve vodách, které mohou mimo jiné přispívat k vývoji antibiotické rezistence.

Dále jsme vyvinuli nové nanokompozitní materiály na bázi CeO₂ nanočástic deponovaných in situ na grafenoxidu a připravili tak bifunkční katalyzátory se schopností hydrolyticky štěpit vybrané polutanty a následně umocnit jejich rozklad pomocí fotokatalytického štěpení. Prokázali jsem schopnost těchto nanokompozitů spontánně hydrolyticky štěpit bisfenol-S (obsahující sulfonylovou skupinu v molekule) a fotokatalyticky odbourávat bisfenol-A a bisfenol-F, což jsou významné polutanty vod narušující endokrinní systém živočichů včetně člověka. Ve vývoji nových fotokatalyzátorů jsme se také věnovali přípravě kompozitních materiálů na bázi polovodičových oxidů s Mo₆. Testování fotokatalytického rozkladu modelových látek ve vodě prokázalo vysoce účinný rozklad polutantů za osvětlení simulovaným slunečním světlem. Snažíme se proto popsat a pochopit mechanismy interakcí v nanokompozitních materiálech, které vedou k této vyšší fotokatalytické účinnosti. To nám umožní vyvinout účinné fotokatalyzátory pro environmentální i jiné aplikace.

Jiří Henych

Hexaferrity a magnetoelektrické vrstvy

Připravili jsme a charakterizovali tenké vrstvy magnetických a magnetoelektrických hexagonálních feritů strukturních typů Y a U. Byl nalezen vztah mezi strukturními vlastnostmi Y vrstev a velikostí magnetoelektrického efektu. Metrické parametry elementární buňky feritu se dají ladit pomocí poměru Ba/Sr ve složení Y hexaferitu. Zjistili jsme magnetoelektrický efekt v případě U hexaferitových vrstev při nízkých teplotách a vyvinuli nový postup přípravy tenkých vrstev Y, Z a U využívající levnější monokrystalické podložky (LaAlO₃ a Y stabilizovaný ZrO₂).

Josef Buršík

Iontové kapaliny jako katalyzátory

Syntetizované iontové kapaliny imidazolového typu obsahující různé kovy jsme použili jako homogenní katalyzátory pro otevření anhydridů a jejich další kopolymeraci s epoxidovými skupinami. Zároveň některé z těchto iontových kapalin byly využity pro katalýzu otevření oxiranového kruhu s následnou cykloadicí s nadkritickým CO₂ za vzniku β-hydroxyuretanu.

Petra Ecorchard

2D materiály pro přípravu polymerů

2D materiály jako grafen a hexagonální BN vytvářejí po modifikaci vodou rozpustnou organickou solí vlákna, která jsou využitelná pro přípravu modifikovaných polymerů.

Ricardo Keitel Donato

Pokročilá borová chemie

Aktivita v oblasti základního výzkumu sloučenin boru byla zaměřena na nové typy reakcí a (poly)substituci na strukturně odlišných heteroborátových aniontech, karboranových a metallakarboranových klastrech. Byla prostudována jejich stereochemie a dosaženo zajímavých fyzikálně-chemických vlastností. Výsledky byly publikovány v řadě prací. Mimo jiné byla popsána fotoluminiscence u 18-ti a 19-ti vrcholových klastrů, acidobazické vlastnosti série aminů kobalt bis(dikarbolidového) aniontu a nové typy selenaboranů.

Bohumír Grüner

Strukturní studie klastrových sloučenin

Proběhly strukturní studie známých i nových typů klastrových sloučenin boru založené na kvantově-chemických výpočtech a difrakčních metodách, studie fyzikálně-chemických vlastností nově připravených látek, a dále pak výpočty elektrostatických potenciálů a nekovalentních interakcí v krystalech. Výsledky tvoří významnou součást publikovaných prací.

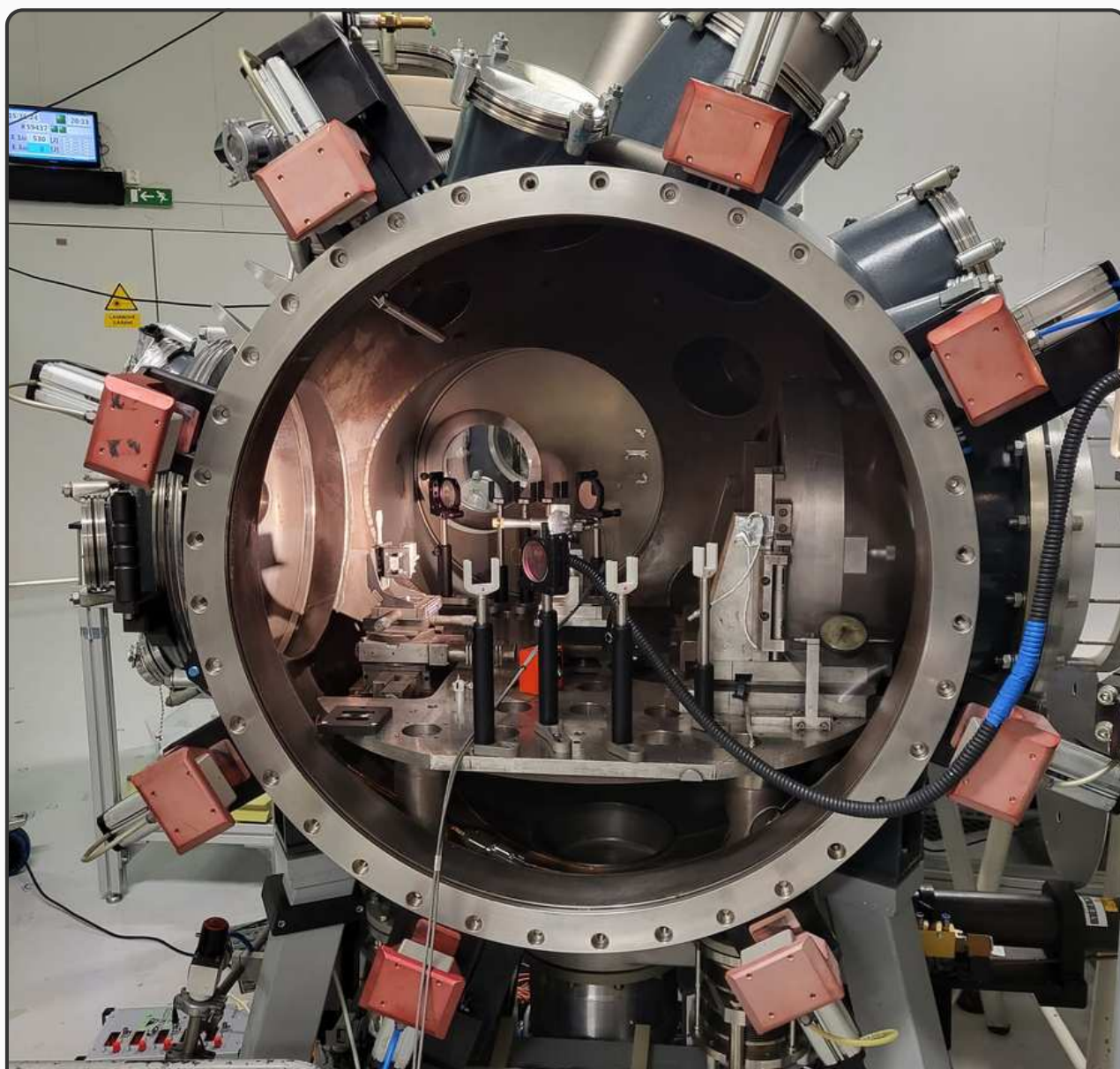
Podobně tomu bylo u studia reakčních mechanismů se zaměřením na přesmyky a izomerace a jejich energetickou bilanci. Byly vysvětlen např. dosud ojedinělý přesmyk atomů uhlíku v kobalt bis(dikarbolidovém) klastru v důsledku přenosu elektronů z nitrilových skupin a propojení perhalogenovaných malých heteroboranů s oktaedrickými strukturami.

Drahomír Hnyk

Proton-borová fúze

Pokračovala spolupráce na Projektu Vortex4Fusion (V4F), podpořená grantem EU Pathfinder. Pro experimenty v roce 2024 jsme získali přístrojový čas na výzkumné infrastruktuře PALS. Během experimentální kampaně jsme testovali proces p - ^{11}B fúze a porovnávali výtěžky alfa-částic z fúze několika nových typů terčů (celkově bylo provedeno více než 300 výstřelů), které byly syntetizovány a charakterizovány v ÚACH. Pro rozšíření množství dat o fúzi z terčů $\text{B}_{18}\text{H}_{22}$ a zlepšení našeho porozumění plazmovým vlastnostem tohoto materiálu, jsme připravili řadu pevných vzorků. Tyto vzorky zahrnovaly pelety stlačené při různých tlacích a také vysoce porézní "pěnové" terče. Dále jsme zlepšili diagnostiku plazmového chování a měření plazmové teploty (tj., energie horkých elektronů) přípravou pelet s obsahem $\text{Cu} - \text{B}_{18}\text{H}_{22}/\text{Cu}$ v hmotnostním poměru 1:1 mezi boranem a mědí. Pro rozšíření diagnostiky jsme také syntetizovali několik nových derivátů selenu $\text{B}_{18}\text{H}_{22}$, v nichž byly atomy selenu integrovány do boranových struktur. Tyto nové sloučeniny vykazovaly významnou luminiscenci. Tyto objevy jsme shrnuli v časopise *Angewandte Chemie*. Dále jsme připravili řadu terčů na bázi sloučeniny s uzavřenou polyedrickou strukturou, preferovanou z důvodu nízké těkavosti a výhodného poměru B:H v molekule pro výrobu pěnových vzorků z vodných roztoků. Bylo připraveno rovněž několik hydroborátových solí a derivátů ligandů.

Michael G. S. Londesborough, Marcel Ehn, Jonathan Bould



Samoorganizované 2D monovrstvy a klastry mědi

V oblasti materiálové chemie probíhala syntéza isomerních bifunkčních derivátů karboranů s SH skupinou, studium jejich ukotvení na kovových filmech a vlastností v samo-skladných monovrstvách. Tyto 2D materiály byly následně využity k vázání kovových iontů koordinační vazbou k mědi a studium stability ligandového obalu exponovaného směrem k vnějšímu prostředí.

Věnovali jsme se také přípravě a charakterizaci karboranovým klastrovým obalem chráněných klastrů, složených ze 4 či 14 atomů mědi a popisu jejich fotofyzikálních vlastností. Byly provedeny strukturní analýzy, depozice v tenkých vrstvách a studium Van der Waalsových interakcí na uspořádání ve vrstvě a orientaci molekul na povrchu.

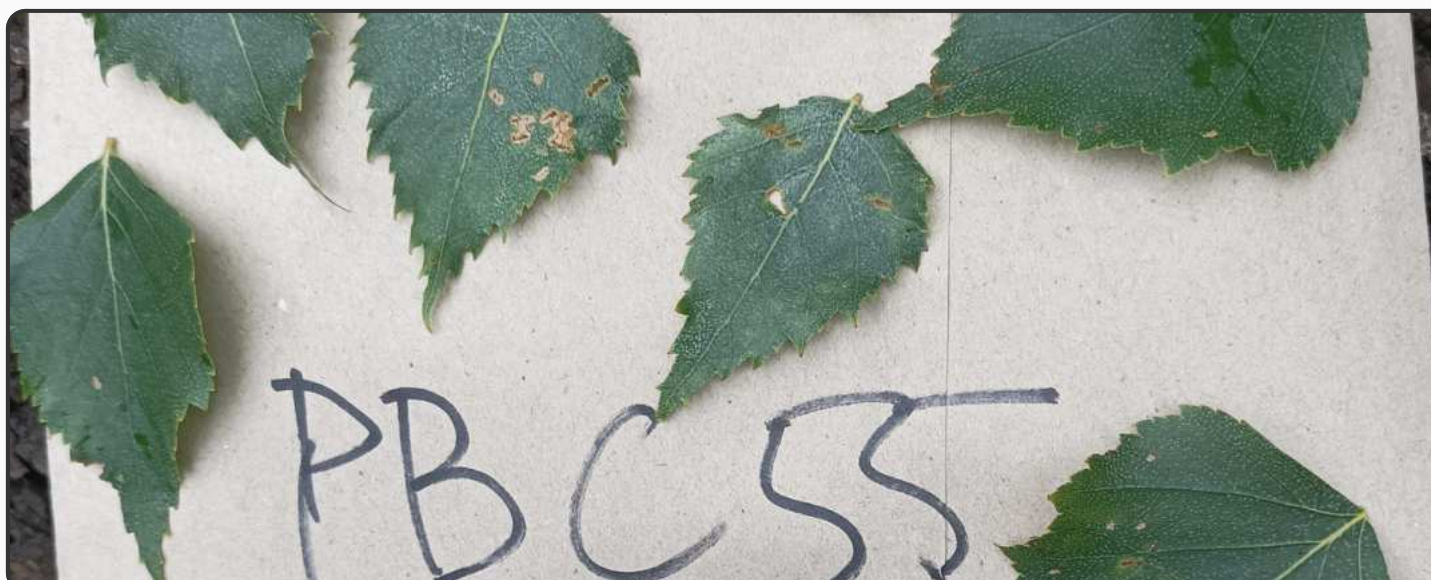
Tomáš Baše

Obsah kovů v listech bříz a mapování půd

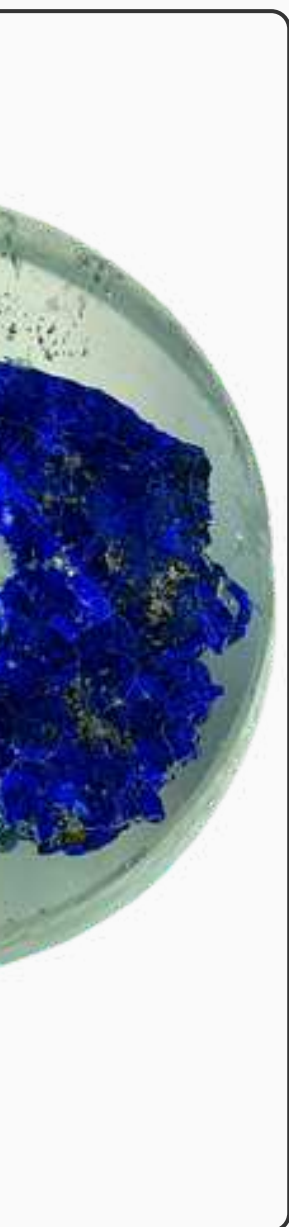
V oboru environmentální geochemie byl prokázán zvýšený obsah manganu a zinku v listech bříz v horských lesích, a to především v souvislosti s poškozením půd kyselými dešti a imisemi z metalurgie. Kromě toho výsledky analýz půd a listů bříz na krušnohorském svahu ukazují s využitím gamaspektrometrie mobilitu iontů Mn ve sklonitých horských půdách v důsledku acidifikace, což je dosud málo probádaný jev. Byla provedena analýza kontaminace půd rizikovými prvky v oblasti Mostecka, Teplicka, a západního okolí Lovosic s cílem rozlišit vliv uhelného průmyslu a geogenních anomálií v tamější zemědělské krajině. Výsledky nesporně prokázaly, že je tento vliv výrazně menší, než se domnívala česká vědecká komunita po desítky let.

Propojením empirického přístupu k výsledkům geochemického mapování půd a nové, vysoce sofistikované metody analýzy vícerozměrných hustot pomocí zcela nových postupů funkcionální datové analýzy bylo interpretováno mapování rizikových prvků v kontaminovaných zemědělských půdách. Pro geochemické mapování půd byla využita rovněž metoda geostatistická, založená na posuvném okně o jisté prostorové velikosti, velmi vhodná pro tvorbu geochemických map v geologicky pestrém prostředí ČR. Tyto výsledky vytvářejí cesty k budoucí spolehlivější analýze výsledků geochemického mapování půd, jež je dosud mnohdy zpracovávána dosti neobratně pomocí velkých modelů typu „černá skříňka“, jako je strojové učení (machine learning).

Tomáš Matys Grygar



Ochrana kulturního dědictví



Provenienční analýza výtvarného umění byla zaměřena na zavedení nových metodických postupů analýzy minoritních a stopových prvků v pigmentech, které mají význam pro provenienční určování výtvarných děl. Zejména byly studovány přírodní azurity, které byly takto analyzovány vůbec poprvé. Bylo zjištěno, že např. obsahy lanthanoidů nebo uranu v azuritových krystalech mohou vést k určení lokality jejich středověké těžby. Zásadní význam měl v roce 2024 nález diasporu - $\alpha\text{-AlO}(\text{OH})$ v podkladových vrstvách pozdně-gotických zlacení, který dokládá nejen použití bauxitů místo červených jílu dovážených dříve ze Středomoří, ale určuje i lokalitu a souvislost s těžbou šedých bauxitů v chorvatské (v té době benátské) Minjeře. Šedé pyritické bauxity byly používány pro výrobu kamence, jehož dovoz byl rovněž ukončen invazí Turků na Balkánský poloostrov. Úspěšná replikace přípravy tzv. „důlní zeleně“, vyráběné od 15. století v oblasti Banské Bystrice srážením Cu solí z důlních vod pomohla určit variabilitu složení a charakteristické morfologické znaky, díky kterým je možné tento pigment ve výtvarných dílech rozpoznávat. V rámci experimentálního studia degradačních procesů byla pozornost zaměřena na studium chování karboxylátů olova a rtuti v olejovém pojivu. Byl zjištěn a popsán rozpad palmitátu rtuťnatého v olejovém filmu při zahřívání kolem 100°C , což byly teploty dříve dosahované i při starých postupech rentoaláže - zpevňování zteřelého plátna nažehlováním plátna nového. Rozpad palmitátu rtuťnatého je doprovázen těkáním rtuti ze systému. Dále bylo zjištěno, že rumělka (HgS) tvoří rtuťnatá mýdla v temperovém pojivu na bázi žloutku a že v přítomnosti olovnatých pigmentů, urychluje tvorbu olovnatých mýdel. Karboxyláty olova procházejí při mírném zahřívání (kolem 110°C) v olejovém pojivu fázovou přeměnou, při které vzniká a je dočasně stabilizovaná vysokoteplotní fáze s tzv. hemi-directed koordinací.přeměnou, při které vzniká a je dočasně stabilizovaná vysokoteplotní fáze s tzv. hemi-directed koordinací. Byla ověřena metodika stanovení volných mastných kyselin pomocí HPLC.

David Hradil, Silvie Švarcová

Fotodegradace mikroplastů

Aerogelové částice TiO_2 , modifikované Fe, a železo-vanadičnanové nanostruktury byly využity pro fotokatalytickou degradaci polystyrenových mikroplastů. Částice TiO_2 po modifikaci Cu/Fe a Ni/Fe produkovaly H_2 při fotokatalytické/Fentonově degradaci mikroplastů.

Guru Karthikeyan Thirunavukkarasu

Aplikovaný výzkum – 3D tisk, jaderný průmysl, dekontaminace

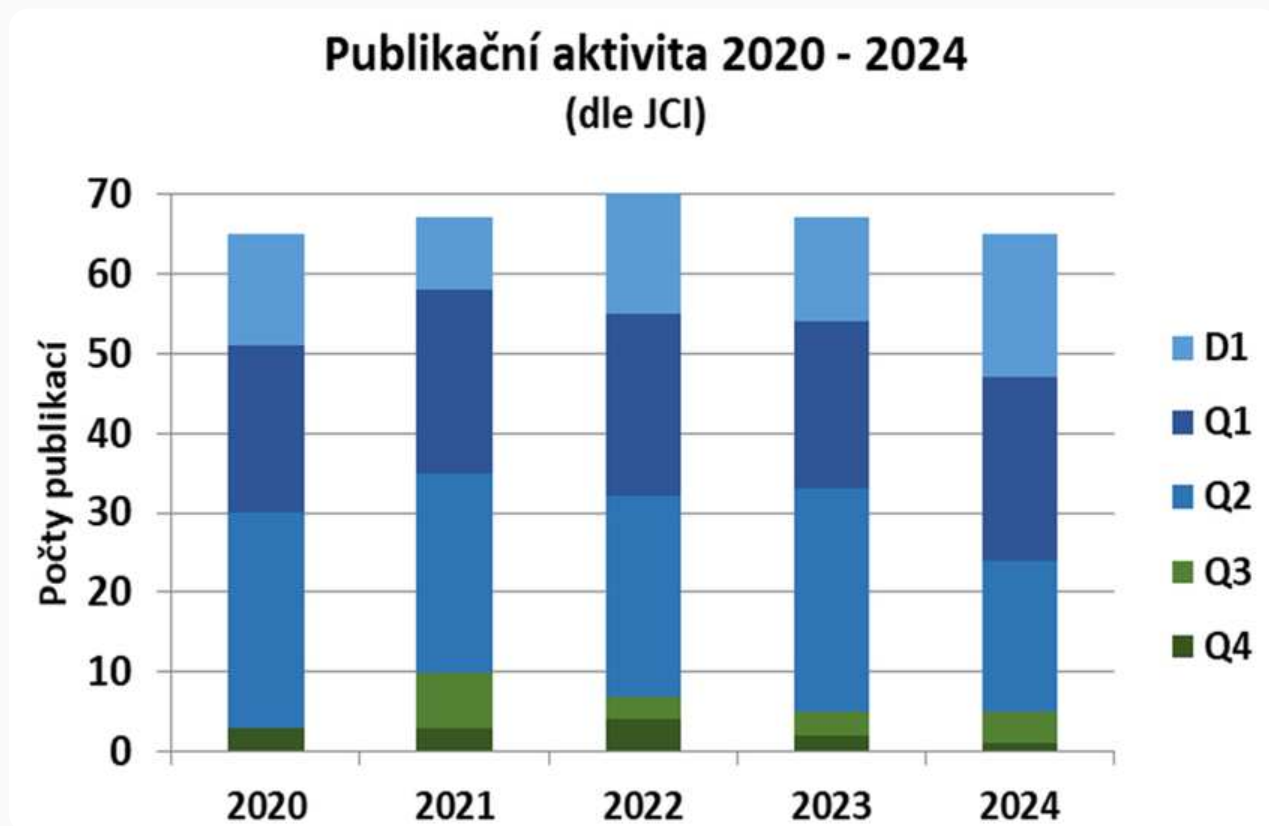
V oboru aplikované anorganické chemie jsme dosáhli výsledků v oblasti:

- pokročilých konstrukčních materiálů pro jaderný průmysl:
 - byla dokončena příprava funkčního vzorek nízkoalkalického konstrukčního betonu pro úložiště s vyhovujícími fyzikálně-chemickými vlastnostmi vhodnými pro bentonitové konstrukce v úložištích,
 - byly dokončeny experimentální práce na vývoji obalových souborů pro jaderné odpady,
 - vyvinuli jsme materiály na geopolymerní bázi pro jaderný průmysl se stínícími vlastnostmi,
- původního anorganického 3D tisku:
 - vyvinuli jsme systém anorganického 3D tisku na bázi laserového protavení anorganických materiálů,
- ekologických a žárovzdorných pojivových systémů z odpadních surovin jako náhrady cementových pojiv:
 - vyvinuli jsme ekologické a žárovzdorné pojivové systémy pro zpracování cihelných a betonových recyklátů na stavební a žárovzdorné prvky,
- ekologických řešení:
 - pro výrobu nových prostředků pro sanaci zateplených omítek napadených zelenou řasou a černou plísní byla navržena nevýhradní licenční smlouva, která je v jednání se soukromým partnerem,
 - byl optimalizován fotokatalytický plovoucí materiál složený z kompozitní aktivní fotokatalytické vrstvy ($\text{TiO}_2 - \text{SiO}_2$) a plovoucího nosiče na bázi napěněného skla; k přípravě byly použity výhradně komerčně dostupné a ekonomicky akceptovatelné komponenty, výsledný produkt je mechanicky, chemicky a ekologicky přijatelný materiál; je opakovaně použitelný pro efektivní odstraňování organických polutantů, jak potvrzují testy v simulovaných reálných podmínkách,
 - oxidy titanu a železa byly připraveny ve větším množství a modifikovány pro dekontaminaci chemických bojových látek, pesticidů; byla stanovena jejich toxicita s ohledem na reálné využití.

Zbyněk Černý, Jiří Plocek

*Získané výsledky byly v roce 2024 zveřejněny v **67 publikacích** v mezinárodních časopisech, z toho významný podíl v časopisech, jejichž kvalita odpovídá prvnímu decilu D1 (18 článků) a prvnímu kvartilu Q1 (23 článků) v oboru (dle JCI).*

Na následujícím obrázku je znázorněn vývoj počtu publikací pracovníků ústavu v období 2020–2024.



Významné výsledky s uvedením citací:

01 Makropolyedrické heteroborany: otevírání nových luminiscenčních horizontů

Citace: Bould J., Ehn M., Tok O., Baval D., Kučeráková M., Clegg W., Litecká M., Lang K., Kirakci K., Londesborough M. G. S.: Expanding Luminescence Horizons in Macropolyhedral Heteroboranes, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63, e202401872.

Makropolyedrická sloučenina anti-B₁₈H₂₂ a její substituované deriváty byly dlouho považovány za jediné borovodíkové sloučeniny schopné fluorescence při ozáření ultrafialovým světlem. Článek ukazuje, že schopnost boranových klastrů vykazovat luminiscenci je ve skutečnosti mnohem širší. Náš výzkum rozšiřuje škálu luminiscenčních materiálů o celou řadu makropolyedrických heteroboranových sloučenin obsahujících síru a selen. Dosáhli jsme významného pokroku v pochopení a aplikaci luminiscence u těchto molekul, což je relevantní jak pro oblast anorganické chemie, tak pro širší oblast užitečných fotoaktivních materiálů. Přítomnost chalkogenů může ovlivnit jak emisní spektrum, tak dobu života excitovaných stavů, což spolu s variabilitou struktur umožňuje ladit optické vlastnosti a otevírá nové možnosti jejich využití v optických senzorech, bioimagingu, optických datových úložištích a vývoji laserových médií.

Objev a studium luminiscence v makropolyedrických heteroboranech nabízejí nový směr v rámci této disciplíny, čímž posilují reputaci ÚACH jako centra pro špičkovou vědeckou inovaci. Publikace dále upevňuje postavení ÚACH jako globálního hráče v oblasti anorganické chemie a materiálového výzkumu. Tato práce podporuje interdisciplinární výzkum ústavu tím, že kombinuje anorganickou chemii s materiálovou chemií, fyzikou a výpočetní chemií. Složitě vztahy mezi strukturou, elektronickým chováním a luminiscencí poskytují úrodnou půdu pro spolupráci s jinými výzkumnými skupinami v rámci ÚACH i mezinárodně.

Spolupracující subjekt: Fyzikální ústav AV ČR, School of Natural and Environmental Sciences, New-Castle University.



Angewandte Chemie
International Edition

Expanding Luminescence Horizons in Macropolyhedral Heteroboranes

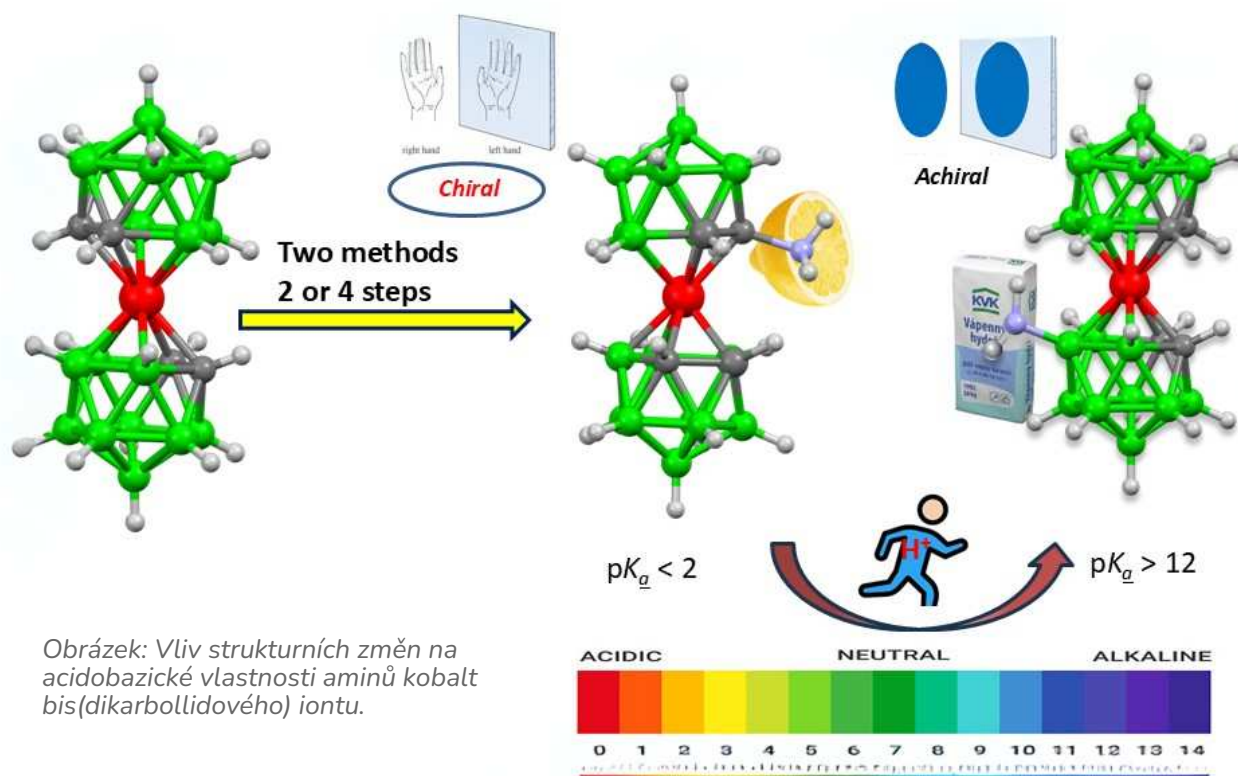
We show that the property of luminiscence from boron hydrides is much more extensive than previously recognized.
Scan here to find out more...

02 Aminoderiváty kobalt bis(dikarbollid) iontu: syntéza, acidobazické vlastnosti a potenciální aplikace nejen v medicíně

Citace: Tüzün, E. Z., Pazderová, L., Bovol D., Litecká, M., Hnyk, D., Růžicková, Z., Horáček, O., Kučera, R., Grüner, B.: Carbon-Substituted Amines of the Cobalt Bis(dicarbollide) Ion: Stereochemistry and Acid–Base Properties. *Inorganic Chemistry*. 2024, 63(43), 20600–20616.

Organické aminy jsou stavebními bloky živých organismů a hrají klíčovou roli v návrhu léčiv. Výzkum na ÚACH se dlouhodobě zaměřuje na využití netradičních bioaktivních sloučenin na bázi boru v této oblasti. Zkoumaný ion kobalt bis(dikarbollid) představuje díky své 3D struktuře, vysoké stabilitě, možnosti chemické modifikace, nízké toxicitě a příznivým farmakodynamickým vlastnostem vhodnou platformu pro vývoj nových léčiv i pro materiálový výzkum. Jeho sloučeniny s aminoskupinami navázanými přímo na uhlíkové atomy klece však dosud nebyly známy. V rámci výzkumu byly nalezeny dvě preparativní cesty k cíleným primárním aminům a tyto látky byly následně strukturně charakterizovány. Porovnání s dalšími dostupnými typy aminů ukázalo, jak změny ve struktuře ovlivňují acidobazické vlastnosti a stabilitu těchto látek. Byl prokázán výrazně kyselý charakter NH_2 skupin navázaných přímo na uhlík, srovnatelný se slabšími anorganickými kyselinami, jako jsou HF či H_3PO_4 . Naproti tomu aminoskupiny vázané na atom boru vykazují silně bazické vlastnosti. Ve spojení s dalšími aminy vyvinutými na ÚACH tak vzniká široká škála acidit, což umožňuje potenciální jemné ladění intermolekulárních interakcí s proteiny a dalšími biomolekulami. Díky své asymetrické struktuře mohou tyto látky sloužit také jako platforma pro studium chirálních interakcí, které hrají v živých organismech klíčovou roli. Tato studie otevírá nové možnosti využití metallakarboranů nejen jako nekonvenčních farmakoforů při vývoji léčiv, ale i v dalších oblastech vědy, například v asymetrické syntéze a chirálním rozpoznávání.

Spolupracující subjekt: Univerzita Pardubice, Farmaceutická fakulta UK.



Obrázek: Vliv strukturních změn na acidobazické vlastnosti aminů kobalt bis(dikarbollidového) iontu.

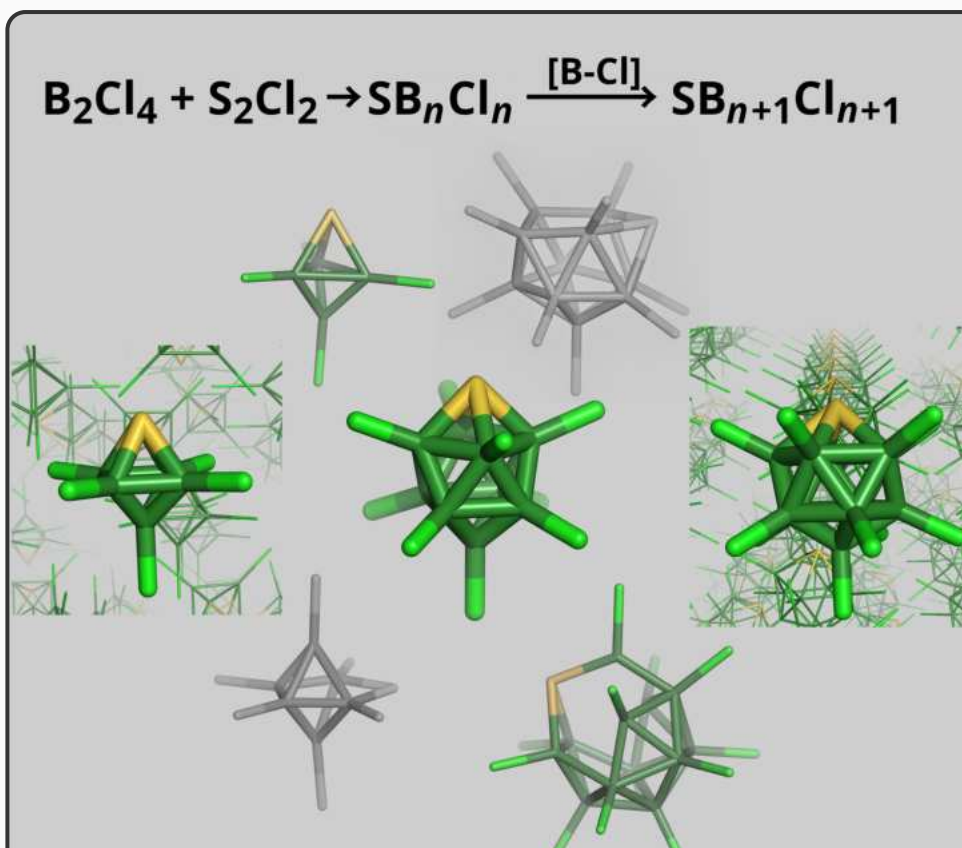
03 Thiaborany s menším počtem vrcholů: první izolace closo-SB₅Cl₅ a dalších polyedrických struktur

Citace: Keller, W., Lissner, F., Ballmann, J., Fanfrlík, J., Hnyk, D., Schleid, T.: A Direct Route to closo-SB_nCl_n Thiaboranes from Simple Electron-Precise Synthons: The Different Role of Chalcogen Bonding in SB₅Cl₅ and SB₁₁Cl₁₁ Crystals. *Angewandte Chemie. Int. Ed.* 2024, 63(46), e202406751.

Thiaborany jsou chemické sloučeniny, ve kterých trojúhelníky B-S-B a B-B-B vytvářejí unikátní prostorové struktury. Tyto sloučeniny mají podobné vlastnosti jako karborany, které se již široce využívají v medicíně, materiálové chemii i katalýze. Přestože byla chemie boru a jeho heteropolyedrických sloučenin intenzivně studována, malé thiaboranové struktury zůstávaly dlouho neznámé. Nyní se podařilo syntetizovat nové polyedrické thiaborany closo-SB₅Cl₅, closo-SB₉Cl₉ a closo-SB₁₁Cl₁₁ kopolyolýzou B₂Cl₄ a S₂Cl₂ při 280 °C ve vakuu. Z hlediska reakčního mechanismu se jedná o termodynamicky diktovaný kaskádovitý růst klecí, který vede k termodynamicky stabilním thiaboranům obecného vzorce closo-SB_nCl_n. Šestivrcholový closo-SB₅Cl₅ je zároveň nejmenší známou molekulou svého druhu, a dále je prvním izolovaným neutrálním polyedrickým thiaboranem s méně než deseti vrcholy, což rozšiřuje dosavadní znalosti o této třídě sloučenin. Sloučeniny byly charakterizovány pomocí hmotnostní spektrometrie, rentgenové difrakce a ¹¹B NMR spektroskopie spolu s moderními výpočetními protokoly. Velmi rychlou hmotnostní spektrometrií byla dále detekována přítomnost dalších, doposud pouze teoreticky předpovězených, thiaboranů closo-SB_nCl_n (n = 4, 6, 10 a 12), což prohlubuje syntézu i dalších sloučenin této skupiny. Výpočetní metody potvrdily geometrie těchto sloučenin, které odpovídají elektronově uzavřeným closo-strukturám. Bylo také prokázáno, že energetické bilance chalcogenových vazeb detekovaných v krystalech dvou sloučenin ovlivňují stabilitu příslušných krystalů. Tyto poznatky otevírají nové možnosti pro následnou modifikaci architektury thiaboranů a jejich případné využití v materiálovém výzkumu a katalýze.

Spolupracující subjekt:
University of Hohenheim,
NSR.

Obrázek: Termodynamicky řízená reakce B₂Cl₄ s S₂Cl₂ produkující thiaborany.



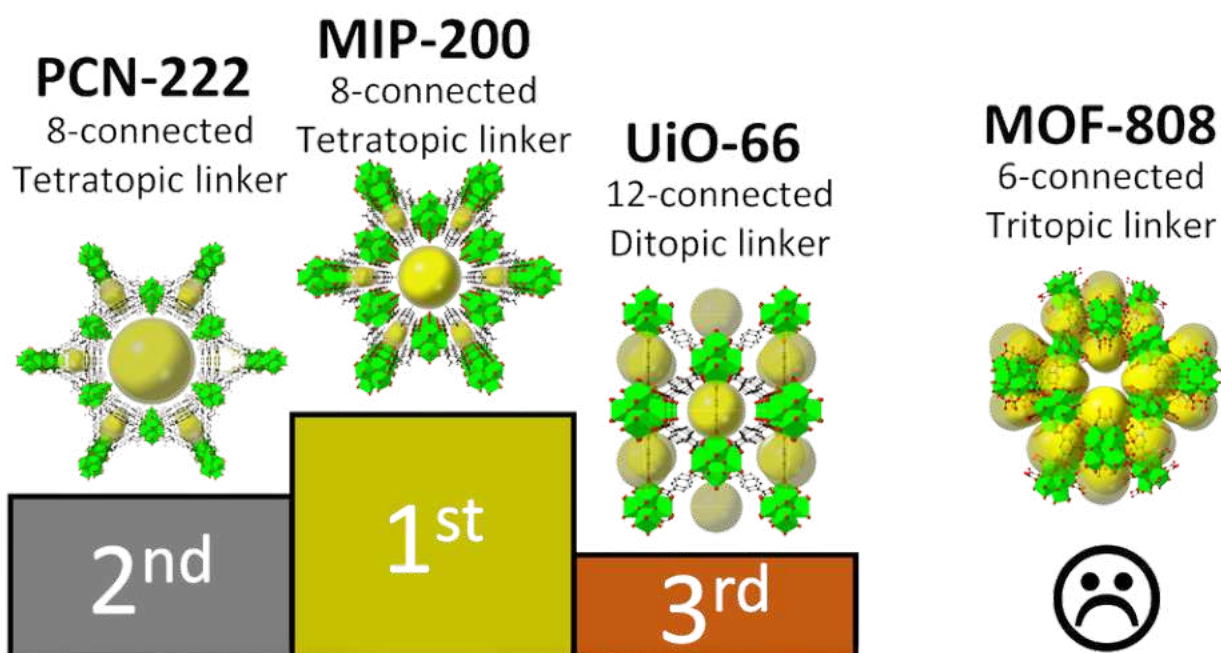
04 Stabilita porézních koordinačních polymerů ve vodném prostředí: krok k širšímu využití

Citace: Bůžek, D., Hynek, J., Kloda, M., Zlámalová, V., Bezdička, P., Adamec, S., Lang, K., Demel, J.: Zirconium-Based Metal–Organic Frameworks: The Relation Between Linker Connectivity, Structure Stability, and Catalytic Activity towards Organophosphates. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2024, 11, 5319–5335.

Porézní koordinační polymery (Metal–Organic Frameworks, MOFs) jsou materiály tvořené kovovými klastrovými jednotkami, které jsou propojeny organickými můstky pomocí koordinačních vazeb (tzv. linkery). Jejich pevná, porézní struktura nabízí širokou škálu aplikací, od zachytu plynů po katalytické procesy využitelné např. i k rozkladu pesticidů v životním prostředí. Přestože jejich výzkum vzkvétá, průmyslové využití je zatím omezené. Hlavním důvodem je nedostatečně prozkoumaná stabilita těchto materiálů v reálných podmínkách. Výzkum v ÚACH se proto zaměřil na studium stability čtyř MOF struktur na bázi zirkonia (Zr) – UiO-66, MOF-808, MIP-200 a PCN-222 (Obrázek) ve vodném prostředí s pH od 3 do 11. Cílem bylo zjistit, který faktor má zásadní vliv na stabilitu MOFů – zda počet koordinačních skupin na linkeru (studovány od 2 do 4), konektivita kovového klastru (studovány od 6 do 12), nebo specifický měrný povrch (studováno od 700 do 1900 m²/g). Prokázali jsme, že ve studovaných případech má rozhodující vliv na stabilitu počet koordinujících skupin na linkeru. Dále byla zkoumána katalytická aktivita MOFů při degradaci methyl-paraoxonu (DMNP), který se běžně používá jako modelová látka (simulant) pro studium degradace organofosfátových pesticidů a nervově paralytických látek. Polymery s nižší stabilitou vykazovaly vyšší katalytickou aktivitu, pravděpodobně v důsledku vzniku defektů, které odhalují aktivní místa na kovových centrech. Z toho vyplývá, že vyšší stabilita neznamená vždy vyšší katalytickou aktivitu. Tento výzkum přispívá k lepšímu pochopení vztahu mezi stabilitou a funkcí MOFů a ukazuje cestu k jejich efektivnějšímu designu.

Spolupracující subjekt: UJEP Ústí nad Labem.

Obrázek: Porovnání porézních koordinačních polymerů na bázi zirkonia z pohledu stability ve vodném prostředí.



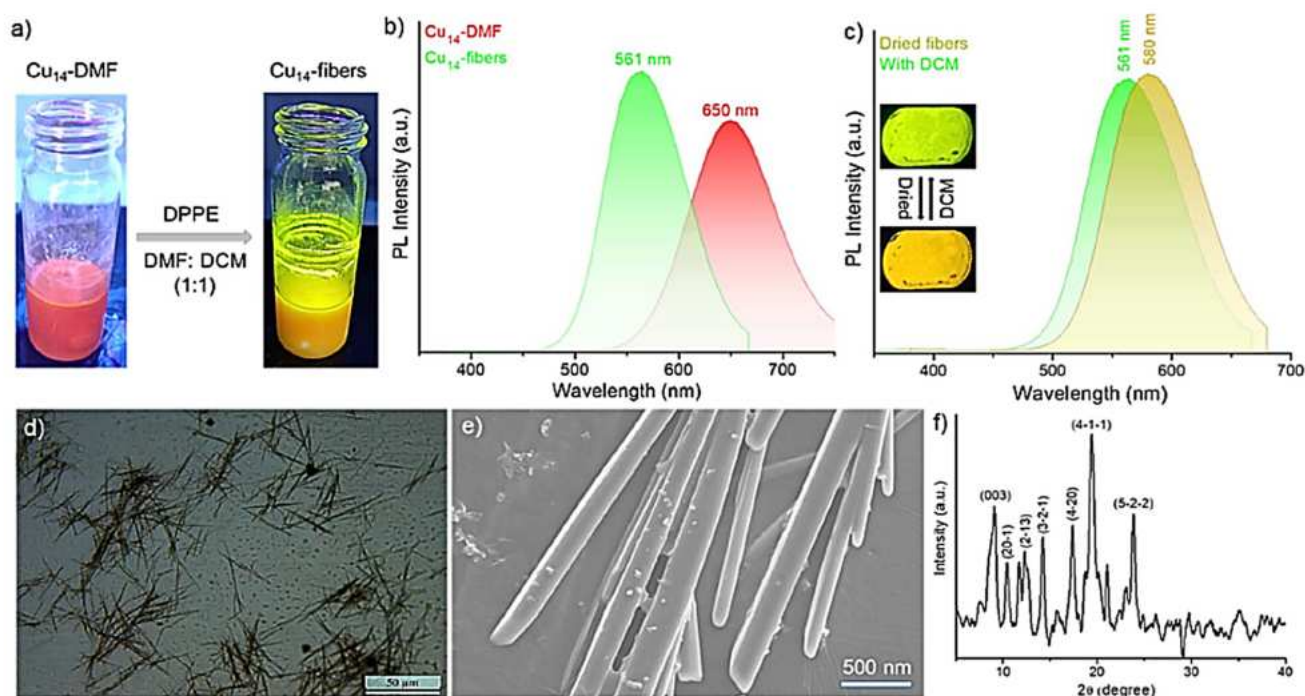
05 Povrchová úprava měděných nanoklastrů jako klíč k ladění luminiscence

Citace: Jana A., Duary, S., Das A., Kini A. R., Acharya S., Machacek J., Pathak B., Base T., Pradeep T.: Multicolor Photoluminescence of Cu₁₄ Clusters Modulated Using Surface Ligands, Chemical Science, 2024,15, 13741–13752.

Luminiscenční nanomateriály nacházejí uplatnění v biosenzorech, zobrazovacích metodách a optoelektronice. Tento výzkum se zaměřil na studium atomárně přesných nanoklastrů mědi s jedinečnými optickými vlastnostmi, využitelnými v bioimagingu, scintilačních zařízeních a katalýze. Mědné nanoklustry s méně než 15 atomy vykazují intenzivní luminiscenci, zatímco větší klustry jsou slabě svítivé nebo bez emise. Syntetizován a analyzován byl Cu₁₄ nanokluster stabilizovaný ortho-karboran-9,12-ditiolem (o-CBDT), jehož struktura zahrnuje Cu₆ jádro obklopené osmi atomy mědi. Povrch tvoří šest o-CBDT ligandů propojených sulfidovými vazbami. Krystalizací s N,N-dimethylformamidem (DMF) vznikly Cu₁₄–DMF krystaly, u nichž DMF molekuly ovlivňují vazebné uspořádání a mění luminiscenci ze žluté na červenou. Další přizpůsobení optických vlastností umožňuje přidání sekundárních ligandů. Použitím difenylfosfinethanu (DPPE) jako spojovacího článku vznikla mikrokrytalická vlákna s jednorozměrným uspořádáním a zelenožlutou luminiscencí. Teoretické výpočty prokázaly, že sekundární ligandy ovlivňují elektronickou strukturu nanoklastru a umožňují ladění emisních vlastností. Tento výzkum přináší nové poznatky o cílené úpravě luminiscenčních vlastností měďnatých nanoklastrů modifikací povrchových ligandů a jejich následné využití v moderních technologiích, jako jsou pokročilé světelné zdroje, biosenzory či nanostrukturované luminofory.

Spolupracující subjekt: Spolupracující subjekt: IIT Madras, Chennai, Indie.

Obrázek: (a) Fotografie reakční lahvičky pod UV lampou (365 nm) ukazující tvorbu Cu₁₄ mikrovláken s asistencí DPPE; (b) srovnání fotoluminiscenčních spekter před a po vytvoření mikrovláken; (c) změna fotoluminiscenčních spekter mikrovláken po interakci s DCM, ilustrující další možnosti úpravy luminiscenčních vlastností. (d) optické a (e) FESEM mikrofotografie připravených mikrovláken; (f) rentgenový difraktogram v práškovém stavu potvrzující krystalinitu mikrovláken.



02

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 podíleli na zajištění přednášek, seminářů a vedení prací v pregraduálních programech Chemie a Geologie (PřF UK v Praze), Chemie (PedF UK v Praze), Ekologie a ochrana prostředí, Ochrana přírody a krajiny; Technologie ochrany životního prostředí (FŽP UJEP v Ústí nad Labem), Chemie a Analytická chemie životního prostředí a toxikologie (PřF UJEP v Ústí nad Labem), Materiálové inženýrství (FSI UJEP v Ústí nad Labem). Působí rovněž ve zkušebních a oborových komisích.

V průběhu letního semestru 2023/2024 a zimního semestru 2024/2025 přednášeli pracovníci ústavu v uvedených programech více než 400 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 (FCHT Univerzita Pardubice), Environmentální chemie a technologie, Aplikované nanotechnologie, Environmental and biomaterial sciences a Strojírenské technologie (FŽP, PřF a FSI Univerzity J. E. Purkyně v Ústí nad Labem) a Fyzikální a materiálové inženýrství (FSv ČVUT).

V roce 2024 pracovalo pod vedením ústavních školitelů 20 studentů DSP. Na řešení výzkumných projektů se účastnili rovněž studenti magisterských programů.

03

Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou

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

3a) Společné projekty vědy a výzkumu podporované z veřejných prostředků:

3a-1) Plovoucí fotokatalyzátor se synergickou sorpční funkcí

Poskytovatel: TAČR, DELTA 2

Partnerská organizace: Vodní sklo, a.s. (řešitel), ÚFCH J.H. AV ČR (spoluřešitel), Giang Son Environment Science & Technology Co., Ltd., Vietnam; Vietnam National University of Agriculture, Hanoi, Vietnam.

Dosažený výsledek a jeho uplatnění:

Pro výrobu plovoucího fotokatalyzátoru bylo použito napěněné odpadní sklo jako plovoucí nosič, anatasová titanová běloba Prertiox AV01 jako fotokatalyzátor a aktivní uhlí jako sorbent. Byl odzkoušen i typ vhodného vodního skla pro fixaci fotokatalyzátoru. Tyto suroviny vykázaly nejlepší vlastnosti jak z hlediska výroby, tak i z hlediska stability produktu ve vodním prostředí a jeho vysoké fotoaktivity. Byly optimalizovány podmínky přípravy a charakterizována fotoaktivita produktu a struktura fotoaktivní povrchové vrstvy. Fotokatalyzátor je určen pro odstraňování vysoce stabilních organických, zejména chlorovaných, toxických polutantů z povrchových vod.

3a-2) Funkční stavební materiály pro jaderné elektrárny - nízkoalkalický beton pro jaderný průmysl

Poskytovatel: TAČR

Partnerská organizace: Centrum výzkumu Řež, s.r.o.

Dosažený výsledek a jeho uplatnění:

Nové funkční stavební materiály pro jaderné elektrárny a podrobná technická zpráva popisující nově vyvinuté materiály, identifikující jejich potenciální použití v jaderných elektrárnách, shrnující provedené experimenty a výpočty; funkční vzorek.

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

V roce 2024 byly uzavřeny významnější hospodářské smlouvy se 13 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)

Anotace: XRD, IČ a Ramanova spektroskopie umožnila stanovit chemické složení, fázové složení, amorfní podíl a měrný povrch modifikovaných TiO₂ vzorků.

Uplatnění: Nezávislé posouzení v rámci EU - výsledky jsou využity pro srovnání s výsledky jiných institucí.

3b-2) Materiály pro jaderný průmysl

Zadavatel: Škoda JS a.s., Plzeň

Anotace: Vývoj 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) Zpracování stavebních odpadů pomocí původních ekologických pojiv

Zadavatel: BETONEXT Production s.r.o.

Anotace: Návrhy technologií pro zpracování cihelných a betonových drtí s využitím původních ekologických pojiv.

Uplatnění: Recyklace odpadních vedlejších surovin ve stavebním průmyslu.

3b-4) Návrhy nových stínících betonů pro jaderný průmysl na geopolymerní bázi

Zadavatel: Centrum výzkumu Řež s.r.o.

Anotace: Návrhy a optimalizace nových radiačně stínících bezpečnostních prvků na bázi geopolymerních materiálů systému tlakovodních malých modulárních reaktorů.

Uplatnění: Vývoj technologie stínících materiálů.

3b–5) Analýzy nově vyvíjených látek pro farmacii

Zadavatel: Quinta Analytica, s.r.o.

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

Uplatnění: Analýzy metodou, kterou nemá zadavatel k dispozici. Tyto analýzy jsou součástí výzkumu a vývoje na pracovišti zadavatele.

3c) Patenty, užité vzory, vynálezy

V roce 2024 byly uděleny 2 patenty:

1. Elektroda a způsob pro detekci uranu ve vodním systému
PV 2022-526; zapsán pod číslem 310005
2. Porézní polymery založené na boranových klastrech
PV 2022-24; zapsán pod číslem 310241

V roce 2024 nebyla uzavřena žádná licenční smlouva.

04

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
- 2021–2024

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

4a-2) SysTem for Safe Biological chEmical Radiological and Nuclear Assessment, Rescue and Decontamination

- STBERNARD, Horizon Europe, 18 řešitelů, 9 účastnických států
- 2023–2026

Tématem projektu je výzkum reaktivních sorbentů pro zachyt a rozklad toxických a nebezpečných látek.

4a-3) Laser Vortex Beams with Extreme Orbital Angular Momentum for Aneutronic Fusion

- VORTEX-4-FUSION, Horizon Europe, 7 řešitelů, 4 účastnické státy
- 2023–2027

Projekt je zaměřen na vývoj čistého a bezpečného zdroje energie bez produkce radioaktivního ionizujícího záření.

4a-4) Fotoaktivní Mo₆ klastry pro udržitelnou sanaci vody

- Evropská zájmová skupina pro spolupráci s Japonskem, 10. společná výzva Solutions for carbon-neutral cities - EIG CONCERT Japan, spolupráce ČR-Francie-Španělsko-Japonsko, 4 účastnické státy)
- 2024–2026

Projekt cílí na vývoj materiálů pro fotodegradaci vodních polutantů a fotoinaktivaci patogenních bakterií indukovanou viditelným světlem.



4b) Konference s mezinárodní účastí, které ÚACH spolupořádal

V roce 2024 byl ústav (spolu) pořadatelem tří konferencí s mezinárodní účastí:

4b-1) International Conference on Solid State Chemistry (SSC 2024)

Datum: 8. -13. září 2024

Místo: Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem

Počet účastníků: 64, z toho 40 ze zahraničí

4b-2) Nanocon 2024

Datum: 16.-18. 10. 2024

Místo: Brno

Počet účastníků: 212, z toho 73 ze zahraničí

4b-3) 7. CrysAC workshop – Provenienční studie v umění a kulturním dědictví

Datum: 1. 7. 2024

Místo: Slovenská národná galéria, Bratislava, Slovensko

Počet účastníků: 67, z toho 50 ze zahraničí



4c) Aktuální dvoustranné dohody se zahraničními pracovišti

4c-1) Téma: Klecové molekuly v samo-organizovaných monomolekulárních vrstvách; partner Univ. California in Los Angeles; California NanoSystems Institute, USA

4c-2) Téma: Využití samo-organizovaných monomolekulárních vrstev ve smart textiles; partner Albstadt-Sigmaringen Univ., Dept. Engineering, 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 výzkumníků z Finska (Tampere Univ.), České republiky (UFP AV ČR), Německa (Leibniz Inst. Photonic Technology, Jena a Juelich Research Centre, Juelich) a Spojené 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: Dept. Pathology, Faculty of Veterinary Medicine, Wroclaw University of Environmental and Life Sciences, Wroclaw, Polsko; Dept. 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: Teplotně odolné, vysoce adhezivní anorganické povlaky na kovy a polymerní profily; partneři: Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem a CQFD Composites, Mulhouse, Francie.

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

Téma: Fotoaktivní nanokompozity na bázi Mo_6 klastr/polovodičová nanočástice pro udržitelnou sanaci vody; partneři: Faculty of Science and Engineering, Waseda University Tokio, Japonsko; Laboratory for Innovative Key Materials and Structures, National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japonsko; Universitat Politècnica de València, Instituto de Tecnología Química, Valencia; CNRS-Université d'Orléans, Orléans, Francie.

Téma: Fotosensibilizátory založené na oktaedrických klastrových komplexech molybdenu pro kosmetické formulace; partner: Université de Tours, Tours, Francie.

Téma: Soft-landing techniky pro depozice fotoaktivních Mo₆ klastrů; partner: Wilhelm-Ostwald-Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Leipzig, Leipzig, Německo.

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

Téma: Vývoj nových materiálů na bázi Aktivního Boranu pro použití jako superkapacitory; partner: National Central University, Taiwan.

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

Téma: Koordinační sloučeniny s potenciálními protinádorovými vlastnostmi; magneticky aktivní komplexy lanthanoidů; partner: Univerzita Pavla Jozefa Šafárika Košice, Slovensko.

Téma: Bioaktivní komplexy přechodných kovů; fotokatalytické materiály TiO₂ a jejich EPR studie; partner: Slovenská technická univerzita v Bratislavě, Slovensko.

Téma: Chemické výpočty karboranových klastrů, teoretické vyhodnocení XPS a Mössbauerových spekter matallakarboranů; partneři: Univ. Nacl. La Plata, CCT Plata, Inst. Invest. Fisicoquim Teor & Aplicadas, La Plata, Argentina, Univ. Buenos Aires, Argentina, Consejo Nacl. Invest. Cient. & Tecn., Inst. Fisicas Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina a Institute of Chemical Physics, CSIC, "Rocasolano" Madrid, Španělsko.

Téma: Syntéza a fyzikálně-chemické vlastnosti klastrových borátových aniontů v roztoku; partner: Univ. Zaragoza, Inst. Sintesis Quim. & Catalisis Homogenea, Zaragoza, Španělsko.

Téma: Využití objemných superchaotropických borátových a metallakarboranových aniontů v supramolekulární chemii, studium přenosu malých peptidů přes buněčnou membránu; partner: Constructor University Bremen, SRN.

Téma: Využití modifikovaných karboranových a metallakarboranových klastrů jako protinádorových léčiv, látek pro borovou neutronovou terapii a paramagnetických metallakarboranů pro značení sekvencí DNA; partner: Institute of Medicinal Biology, PAN, Polsko.

Téma: Studium karborany modifikovaných povrchů a kovových nanoklastrů; partneři: Indian Institute of Technology Tamil Nadu, Indie, Indian Inst. Technol., Chennai, India, Middle East Tech Univ Ankara, Turecko a UCLA, Los Angeles, USA.

Téma: Nové typy malých kovových nanoklastrů; partner: Karlsruhe Institute of Technology, KIT, Karlsruhe, Germany.

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

Téma: Halogenované heteroborany, kationtové systémy, jejich vznik, vazebné poměry a termodynamika jejich vzniku; partneři: Universität Hohenheim, Univ. Leipzig, Wilhelm Ostwald Inst. Phys. & Theoret. Chem., Lipsko, Heidelberg Univ. Heidelberg a University Würzburg, Würzburg, všichni ze SRN.

Téma: Fotofyzikální vlastnosti makropolyhedrálních klastů s fúzovaným skeletem; partner: Friedrich Schiller University, Jena, Inst. Phys. Chem., Jena, SRN.

Téma: Členství v EU Pathfinder konsorciu „Vortex-4-Fusion“ spolu s členy z Tampere University ve Finsku, Peter Grünberg Institutem v Jülichu, Německo, Leibniz Institute of Photonic Technology, University of Jena, Německo, Institute of Plasma Physics v Praze, laboratoří Prof. Georg Pretzlera, Heinrich Heine University v Düsseldorfu, Německo.

Téma: Diamond Light Source beamline X-ray Crystallography; partner: Newcastle University, UK.

Téma: Příprava a studium specializovaných terčů na bázi boron-hydridů pro studie laserem řízené imploze mikrobublin; partner: Univerzity Sannio, Itálie.

Téma: Výzkum reaktivních sorbentů pro záchyt a rozklad toxických a nebezpečných látek; Universidad de Alcalá de Henares, Alcalá de Henares, Španělsko.

Téma: Vývoj TiO_2 materiálů s vysokým sorpčním povrchem; partneři: Dept. of Chemistry, Lund University, Švédsko a Materiálovo-technická fakulta a Centrum pro nanodiagnostiku, Slovenská technická univerzita v Bratislavě, Bratislava, Slovensko.

Téma: 3DMAX a 2DMXene fáze jako nanokrystalické filmy a práškové polykrystalické materiály; partner: Dept. Physics, The University of Illinois at Chicago, Chicago, USA.

Téma: Kovové uhlíkové filmy z funkcionalizovaného grafenu; partner: Centre for Advanced 2D Materials, National University of Singapore, Singapore.

Téma: Iontové kapaliny; partner: IMP, INSA Lyon, Francie.

Téma: Fotoindukovaná degradace mikroplastů pro výrobu vodíku pomocí modifikovaných nanostruktur TiO_2 ; partner: Vienna Univ. Technology, Rakousko.

Téma: Materiálová toxicita a hodnocení fotokatalytické/Fentonové eliminace bakterií a mikroplastů pomocí různých oxidů kovů; partneři: Wroclaw Medical University, Polsko a Chonnam National University Medical School, Jižní Korea.

Téma: Kvalifikované zpracování geochemických dat; partner: Division for Marine and Environmental Research, Ruđer Bošković Institute, Záhřeb, Chorvatsko.

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

Téma: Analýza malířských materiálů synchrotronovými difrakčními technikami, partner v rámci Historical Materials BAG (block allocation group) pro období 2024-26, The European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, Francie.

Téma: Historická těžba materiálů pro výtvarnou technologii; partneři: Technische Universität Bergakademie Freiberg a Nickelhütte Aue, Německo, University of Zagreb a Croatian Natural History Museum, Chorvatsko, Geologický ústav SAV, Bratislava, Slovensko.

Téma: Analýza pozdně-gotických děl a výroba zelené Cu barvy na Slovensku; partneři: Slovenská národní galéria Bratislava, Slovensko, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Německo.

05

Vzdělávací činnost pracovníků ústavu

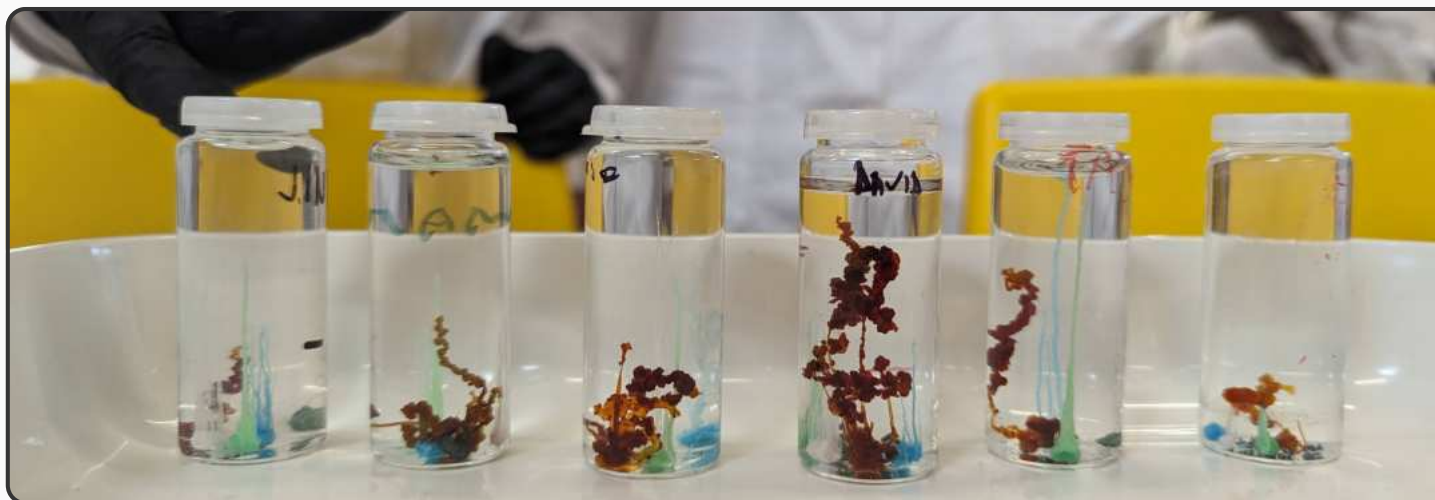
Účast pracovníků ústavu při uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů je popsána v kapitole 2. Pozornost byla věnována rovněž studentům středních škol, např. v programu AV ČR Otevřená věda, žákům ZŠ (volnočasové aktivity zaměřené na vysvětlení základních přírodních principů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

06

Popularizace vědy

Ústav anorganické chemie AV ČR se dlouhodobě a cíleně věnuje popularizaci vědy a šíření poznání napříč generacemi – od nejmladších dětí až po odborníky. Naším cílem je otevírat svět vědy veřejnosti a ukazovat, že chemie může být nejen užitečná, ale i zábavná. Věříme, že otevřená komunikace posiluje důvěru ve vědu a přispívá ke kultivaci veřejného prostoru.

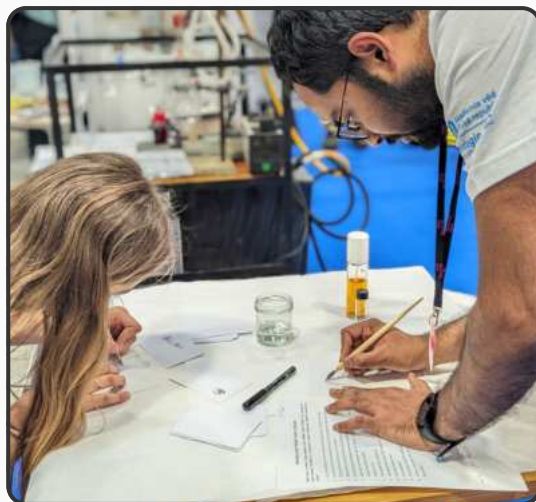
V roce 2024 jsme navázali na předchozí roky a připravili celou řadu rozmanitých aktivit, které měly velký dosah i ohlas. Začátkem března jsme společně se Spolkem přátel ZŠ a MŠ Husinec-Řež uspořádali **dětskou laboratoř** s tématem krystalů, která přilákala desítky malých návštěvníků k pokusům a tvoření.



V květnu jsme byli partnerem programu Fulbright Specialist s profesorkou **Anne Andrews** (The Brain is Not a Computer), která v rámci Týdne mozku vedla cyklus přednášek a diskusí na pomezí neurověd a chemie.



Tradičně silnou popularizační akcí byl i **Veletrh vědy**, kde jsme nabídli bohatý program: dílničky pro děti, únikovou hru „Přísně tajný výzkum“, VR hru o boji s meteority, prezentaci ekologických stavebních materiálů i výstavu ALMA – „Maluj jako starý mistr.“



Na akci **Zažít město jinak** jsme zaujali veřejnost vědeckou show a zmrzlinou z kapalného dusíku, stejně jako dílničkami v obří molekule.



Na podzim jsme otevřeli brány našich laboratoří v rámci **Týdne Akademie věd** s tématem „Materiály pro životní prostředí“ – exkurze a výklad přilákaly školy i širokou veřejnost.

V rámci popularizačního projektu Otevřená věda AV ČR jsme se celoročně také věnovali vývoji a testování nového workshopu pro školy s detektivní zápletkou a stanovišti inspirovanými reálným výzkumem na ÚACH. Workshop byl testován na několika institucích a byl příjemným zpestřením výuky.



Vedle fyzických akcí jsme věnovali pozornost také sociálním sítím, komunikaci s médii a propojení s vědeckou komunitou. I jako menší pracoviště se tak snažíme držet krok s největšími ústavy Akademie věd a budovat důvěru ve vědu prostřednictvím otevřené, srozumitelné a inspirativní komunikace.

V. Další činnost

Hodnocení další a jiné činnosti

V rámci jiné činnosti byly v roce 2024 uzavřeny smlouvy v hodnotě 1 804 tisíc Kč.

VI. Nápravná opatření v hospodaření

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

V roce 2024 nebyla provedena žádná kontrola.

VII. Hospodářské výsledky a vývoj

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

Ústav hospodařil v roce 2024 s vyrovnaným rozpočtem.

Prostředky na rozvoj výzkumné instituce (RVO) poskytnuté z rozhodnutí zřizovatele v roce 2024 byly přibližně o 4 % vyšší než v roce předchozím. Vedle institucionální dotace byla v roce 2024 část rozpočtu ústavu (cca 32 % neinvestičních nákladů) tvořena účelovými prostředky (MŠMT, GA ČR, TA ČR, Horizon 2020 a Horizon Europe).

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 (1 804 tisíc Kč, viz výše) byl v roce 2024 v rámci hlavní činnosti realizován smluvní výzkum ve výši 1 390 tisíc Kč. Výnosy z uzavřených licenčních smluv činily 455 tisíc Kč. Příjmy ze smluv a licencí doplňují rozpočet ústavu tvořený převážně dotacemi ze státních prostředků.

VIII. Budoucí výzkum a cíle ústavu

Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště

V rámci jiné činnosti byly v roce 2024 uzavřeny smlouvy v hodnotě 1 804 tisíc Kč.

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 2025 vycházejí z výzkumných záměrů ÚACH a z výsledků národních a mezinárodních projektů dosažených v předchozích letech, které mají přesah do roku 2025 a dále.

Vývoj Mo_6 nanomateriálů pro medicínu a životní prostředí

📍 Budeme připravovat klastry Mo_6 pro radiosenzitizaci, fototerapii i dekontaminaci vody a povrchů.

V oblasti materiálové chemie se zaměříme se na vývoj oktaedrických klastrových komplexů molybdenu (Mo_6) a kompozitních materiálů s obsahem Mo_6 pro:

- radiodynamickou terapii, která je založena na schopnosti těchto nanomateriálů stimulovat produkci reaktivních forem kyslíku v tumorové tkáni po ozáření rentgenovým zářením. Budeme vyvíjet nanočástice složené z Mo_6 klastrů s jedinečnou variabilitou koordinační sféry, které mohou být aktivními radiosensitizátory i za hypoxických podmínek.

- fotodynamickou terapii (PDT). Budeme doladovat strukturu Mo₆ klastrů k dosažení jejich vysoké stability ve vodném prostředí a pro cílené biologické aplikace.
- antimikrobiální PDT pro kosmetické formulace na kožní infekce.
- fotodegradace toxických/perzistentních polutantů a fotoinaktivace patogenních bakterií indukované viditelným světlem – nové účinné nanokompozitní materiály Mo₆/polovodičová nanočástice v koloidní, filmové a nanovlákněné membránové formě. Předběžné experimenty ukazují, že některé připravené nanokompozity jsou slibnými materiály pro fotodegradaci toxických chemikálií a bakterií.

Biologická aktivita všech Mo₆ biomateriálů bude testována ve spolupráci s týmem z VŠCHT, Praha.

Aplikace Aktivního Boranu v heterogenní katalýze

📌 *Zaměříme se na reakce s vysokým společenským dopadem – například defluoraci či dehydrataci ethanolu.*

Jedním z našich hlavních budoucích témat je také využití Aktivního Boranu jako lewisovsky kyselého heterogenního katalyzátoru. Zaměříme se na reakce s velkým společenským potenciálem, jako je například defluorace perzistentních polutantů a dehydratace ethanolu na ethylen. Bude se jednat především o přípravu katalyzátoru s vyšší kyselostí, tak aby byl schopen rozkládat i obtížnější substráty nebo byl aktivní za nižší teploty. Dále budeme studovat kompozity Aktivního Boranu s jinými porézními strukturami za účelem snížení ceny katalyzátoru, zabudování přechodných kovů abychom dostali bifunkční katalyzátor. Chceme nalézt i další možné aplikace Aktivního Boranu, především formou spoluprací (viz např. v superkapacitorech ve spolupráci s kolegy z Taiwanu nebo Li bateriích, kde spolupracujeme s kolegy z Německa).

Nové MOFy pro stabilitu a sorpční účinnost

📌 *Budeme testovat jejich chemickou odolnost, vodivost i afinitu k polutantům.*

Budeme nadále pokračovat ve výzkumu MOFů. Zaměříme se zejména na fosfinátové a karboxylátové MOFy vykazující dostatečnou chemickou odolnost (např. MIP-200) a na testování stability MOFů při dlouhodobém vystavení podmínkám odpovídajícím jejich reálnému použití. Budeme vyvíjet i nové MOFy obsahující volné funkční skupiny ve struktuře, které pomohou zvýšit mobilitu protonů nebo afinitu materiálů k vybraným emergentním polutantům. Protonová vodivost připravených materiálů bude studována ve spolupráci s Univerzitou Pardubice a odstraňování polutantů ve spolupráci s Fakultou životního prostředí UJEP.

Rozvoj metody krystalické houby

- 📍 *Budeme optimalizovat Crystalline Sponge pro nové typy molekul a propojit ji s neuronovými sítěmi.*

Zaměříme se také na využití MOFů v krystalografii. Budeme dále rozvíjet metodu krystalické houby, tzv. „Crystalline Sponge Method“. Ve spolupráci s MFF CUNI budeme pokračovat v použití molekulových dynamických simulací na zlepšení lokalizace atomů a s VŠCHT a FZÚ AV ČR na využití neuronových sítí pro zlepšení rozlišení v mapě elektronové hustoty. Metodu plánujeme rozšířit i na oblast elektronové difrakce, což vylepší dosavadní techniku a umožní její použití pro další látky.

Přímé určování elektronové hustoty v krystalech

- 📍 *Implementujeme modul do programu JANA2020 pro výpočet vazebných vlastností z experimentálních dat.*

Další směr, který začneme rozvíjet v oblasti krystalografie, je rozšíření experimentální metody rentgenové difrakce na monokrystalu pro přímé stanovení elektronových a vazebných vlastností molekul. Do volně dostupného programu JANA2020 bude ve spolupráci s FZÚ AV ČR implementován nový modul, který za využití krystalograficko-matematického teorému „Atomy v molekule“ bude počítat zcela novým nekonvenčním přístupem vazebné parametry z reálných dat v daném krystalu, a ne pouze použitím teoretických predikcí, jak je běžné nyní. Tento směr výzkumu budeme rozvíjet se zahraničními partnery z UCSD a UCLA.

Design luminiscenčních superkyselin na bázi boru

- 📍 *Zaměříme se na struktury s řízenými optickými a katalytickými vlastnostmi.*

Navážeme na předchozí práci ve výzkumu kationtových sloučenin boru jako lewisovských superkyselin. Budeme dále pracovat na optimalizaci jejich designu s cílem modulovat jejich luminiscenční vlastnosti, jako jsou emisní maxima a luminiscenční kvantové výtěžky. Dále budeme studovat reaktivitu a hledat možnost využití boreniových solí jako katalyzátorů pro reakce typu C-H aktivace, hydroborace či redukce CO₂.

Výzkum reaktivity CeO₂ pro ekologické aplikace

📍 *Budeme studovat hydrolytické a redoxní procesy v interakci s léčivými a polutanty.*

Stále budeme intenzivně studovat reaktivitu nanomateriálů na bázi oxidu ceru v environmentálně a biologicky relevantních reakcích. Prokázání spontánního hydrolytického štěpení sulfonamidů otevírá možnost se zaměřit i na další molekuly obsahující sulfonylové funkční skupiny, nebo amidové či obdobné vazby, jako jsou např. herbicidy na bázi sulfonylmočoviny či betalaktamová antibiotika. Katalyzovaný rozklad těchto látek je zajímavý z hlediska odstraňování emergentních polutantů z vod. Předpokládáme, že acido-bazické hydrolytické reakce na CeO₂ mohou být také využity např. ke štěpení peptidických vazeb. K objasnění mechanismu této reaktivity jsme dosud využívali především experimentální metody s využitím modelových látek a detailní materiálovou charakterizací. Nově jsme navázali spolupráci s týmem prof. Ye Xu (Louisiana State University), který se zabývá využitím metod výpočetní chemie ke studiu heterogenních katalytických reakcí či atomistického modelování povrchových a mezifázových vlastností a reakcí, zejména na CeO₂. První společné výsledky naznačují dobrou shodu mezi experimenty a teoretickými výpočty, což by nám mohlo umožnit lépe pochopit a predikovat reaktivitu CeO₂ nanostruktur. Kromě studia polutantů a látek v kapalném mediu se chceme nově zaměřit na studium katalytických reakcí na rozhraní vzduch/pevná látka, tj. např. rozklad typických polutantů nacházejících se ve vzduchu ve vnitřních prostorech, za využití nově instalovaného FTIR spektrometru se speciální měřicí celou pro operando/in situ experimenty.

Hybridní fotokatalyzátory s Mo₆ klastry

📍 *Zaměříme se na vývoj nanokompozitů pro rozklad toxických látek, znečištění a bakterie.*

Jak naznačují naše poslední dosažené výsledky, reaktivitu a fotokatalytickou aktivitu polovodičových oxidů včetně CeO₂ lze úspěšně modifikovat tvorbou nanokompozitních materiálů, např. s jinými nanostrukturami (jako jsou uhlíkové nanomateriály) či pomocí tzv. fotosenzitizátorů. Jako velmi zajímavá se jeví kombinace polovodičových nanočástic s oktaedrickými Mo₆ klastry. Předběžné výsledky prokazují zvýšenou fotoaktivitu či změnu adsorpčních vlastností. Budeme se dále věnovat vývoji těchto hybridních materiálů se zaměřením na studium základních fotofyzikálních a fotochemických vlastností, synergismů i mechanismu degradačních reakcí či studovat jejich antibakteriální a toxikologické vlastnosti.

Magnetoelektrické vrstvy hexaferritů

- 📍 *Budeme pokračovat ve vývoji vrstev Y, Z a U typů a objasníme jejich strukturní vztahy.*

Dále budeme připravovat tenké vrstvy magnetických a magnetoelektrických hexagonálních feritů strukturních typů Y a U a studovat zejména jejich magnetoelektrický efekt. Cílem je především objasnit vztah mezi strukturními vlastnostmi Y vrstev a magnetoelektrickým efektem. Budeme pokračovat ve studiu magnetoelektrického efektu U hexaferritových vrstev. Také se budeme věnovat vývoji postupů přípravy tenkých vrstev Y, Z a U s využitím vhodnějších monokrystalických podložek (LaAlO_3 , Al_2O_3 , MgAl_2O_4 a Y stabilizovaného ZrO_2).

Využití iontových kapalin v katalýze a polymerizaci

- 📍 *Budeme testovat jejich účinnost při otevření kruhů a dalších klíčových reakcích.*

Podvojně vrstevnaté alkokidy nebo grafen budou modifikovány iontovými kapalinami s obsahem i bez obsahu kovu a bude sledována efektivita jejich katalytických schopností především při polymerizaci s otevřením kruhu (epoxidy).

Degradace mikroplastů pomocí fotokatalyzátorů

- 📍 *Zaměříme se na aerogely, vanadičnany a jejich porovnání s komerčními materiály.*

Aerogelový TiO_2 modifikovaný Cu/Fe a Ni/Fe bude i nadále využit pro foto-Fentonovou degradaci mikroplastů. Fotokatalytické aktivity nanostruktur budou porovnávány mezi vanadičnany železnatými a komerčními fotokatalyzátory pro degradaci mikroplastů a inaktivaci bakterií.

Vývoj materiálů pro zachyt CO_2 a environmentální využití

- 📍 *Budeme spolupracovat na funkčních fázích vhodných pro sorpci i chemické interakce.*

Bude pokračovat spolupráce na mikroskopické studii 3D MAX a 2D MXene fází ve spolupráci s UIC Chicago. Tyto materiály budou testovány pro zachycení CO_2 .

Bude pokračovat vývoj nanostruktur na bázi TiO_2 a uhlíkových nanotrubelek. Soustředíme se na materiály funkční v kyselé oblasti a také titanáty s obsahem aminů pro sorpci aniontů, CO_2 apod. Vývoj vysoce vodivých kompozitních filmů bude zkoumán i z pohledu mechanismu. Dalšími studovanými kompozitními materiály budou nitrid boru/polymery jako nosiče léčiv s dlouhodobou životností.

Základní výzkum sloučenin boru a jejich fyzikálně-chemických vlastností

📌 *Budeme studovat nové typy klastrů, jejich reaktivitu, struktury a elektronové vlastnosti.*

Aktivita v oblasti základního výzkumu sloučenin boru bude nadále zaměřena na vývoj nových typů reakcí a (poly)substituci na strukturně odlišných borátových aniontech, karboranových a metallakarboranových klastrech, pochopení jejich stereochemie a dosažení zvolených fyzikálně-chemických vlastností.

Budou prováděny strukturní studie známých i nových typů klastrových sloučenin boru založené na kvantově-chemických výpočtech a difrakčních metodách, studie fyzikálně-chemických vlastností nově připravených látek, a dále pak výpočty elektrostatických potenciálů a nekovalentních interakcí v jejich krystalech.

Dále bude probíhat studium reakčních mechanismů se zaměřením na přesmyky a izomerace a jejich energetickou bilanci.

Borové materiály pro jadernou fúzi

📌 *Budeme optimalizovat terče pro $p\text{-}^{11}\text{B}$ fúzi, testovat nové sloučeniny a vylepšovat diagnostiku interakcí s laserem.*

Bude pokračovat spolupráce na Projektu Vortex4Fusion (V4F), podpořeném grantem EU Pathfinders. Hlavní zaměření pro rok 2025 bude pokračující zdokonalování $p\text{-}^{11}\text{B}$ fúzních terčů na bázi hydroborátů, optimalizovaných pro jejich produkci alfa částic. Pozornost bude věnována jak molekulární povaze terčů, tak i jeho makrostruktuře, kterou považujeme za klíčový faktor počáteční interakce laseru s terčem. Také máme v plánu vyvinout syntetický postup pro několik terčů na bázi hydroborátů obohacených o izotop ^{11}B .

Karborany a metallakarborany pro medicínu a senzory

- 📌 *Budeme vyvíjet deriváty pro povrchovou chemii, magnetickou rezonanci a potenciální antibiotika.*

V oblasti materiálové chemie bude probíhat syntéza derivátů karboranů s SH skupinou pro jejich ukotvení na kovových filmech a studium vlastností v samo-organizovaných monovrstvách. Tyto 2D materiály budou následně využity k vázání kovových iontů koordinační vazbou k povrchu a studium stability ligandového obalu exponovaného směrem k vnějšímu prostředí.

V oblasti potenciálních aplikací karboranů a metallakarboranů v medicíně bude pokračovat vývoj syntézy biologicky aktivních klastrových sloučenin se zacílením na nádorové buňky a s využitím jako antibiotika. Dále bude pokračovat vývoj systémů využitelných pro zobrazovací metody v diagnostice nádorových onemocnění, především látek vhodných pro ^{11}B MRI metody a jejich testování.

Studium chiralidy a biologických vlastností klastrů

- 📌 *Zaměříme se na enantiomery a jejich vliv na aktivitu a interakce ve tkáních.*

Budeme pokračovat ve studiu chiralidy borových klastrových sloučenin, metod pro separaci enantiomerů a stereoselektivních reakcí na skeletech neutrálních látek i aniontů. Ve spolupráci s Farmaceutickou fakultou UK bude studium zaměřeno i na vliv chiralidy na biologické vlastnosti aktivních sloučenin a další možné aplikace chirálních molekul.

Spolu s University of Hohenheim bude věnována pozornost vlastnostem originálních piktoгена- a chalkogenaheteroboranů, včetně termodynamiky jejich vzniku.

Rovněž bude pokračovat úspěšná spolupráce se skupinou z Constructor Univ. Bremen, SRN, v jejímž rámci se zaměříme na fyzikálně-chemické studium interakcí modifikovaných klastrových iontů s liposomy a proteiny se zacílením na deriváty 1-karba-dodekaborátového iontu. Dále bude studována schopnost těchto látek přenášet vybrané proteiny přes buněčnou membránu.

Geochemie a udržitelný přístup ke krajině

- 📌 *Budeme analyzovat kontaminace, příjem živin a rekultivační strategie výsypek.*

V oboru environmentální geochemie budou pokračovat výzkumné aktivity zaměřené na vývoj nových metod statistické analýzy geochemických dat. Práce bude mít dva aspekty – obecný geochemický (zpracování velkých datových souborů v geochemii) a konkrétní environmentální.

Bude pokračovat geochemické mapování kontaminace půd vybraných měst ústeckého kraje (Teplice, Krupka, Bílina a Litvínov). V rámci této práce se budou využívat nové geostatistické metody. Cílem bude odlišit vliv využívání uhlí a jiných antropogenních faktorů (husté městské osídlení, doprava) od přírodních faktorů (krušnohorská geogenní anomálie). Měly by být dokončeny práce na příjmu nežádoucích prvků Mn a Zn břízami v oblastech narušených lidskou činností. Analýza jejich listových koncentrací je vhodná k mapování kontaminovaných, acidifikovaných a živinami chudých půd. Prokračovat budou aktivity zaměřené na téma dostupnosti živin na výsypkách po těžbě hnědého uhlí v mostecké pánvi a zhodnocení jejího posuzování podle obsahu živin a nežádoucích prvků (Mn a Zn) v listech stromů. Cílem je alternativní pohled na přístup k výsypkám, který se dnes radikálně mění obratem od rekultivací k ponechání přírodě. Je možné, že tento dnes jednostranně upřednostňovaný přístup v sobě nese riziko, že na nerekultivovaných výsypkách budou rostliny stresované nedostatkem celkových nebo biodostupných živin.

Materiálový výzkum výtvarného dědictví

📌 *Prohloubíme studium pigmentů, datovacích metod a degradace historických uměleckých děl.*

V oblasti provenienční analýzy výtvarného umění bude dokončen výzkum kobaltových skel a pigmentového smaltu ve výtvarném umění se zaměřením na klíčovou změnu v surovině na začátku 16. století, kdy se začala používat kobaltová ruda s vysokým obsahem As z oblasti Schneebergu a Jáchymova. Obsah As a dalších minoritních a stopových prvků v kobaltových sklech z archeologických nálezů a malířských vrstev bude rozhodující pro určení provenience použité suroviny a technologického postupu jejího zpracování.

Dále budou studovány nové přístupy pro určování datace a provenience malířských děl využívající prvkové a izotopové analýzy a datování pomocí racemizace aminokyselin. Vzhledem ke značně komplikovanému charakteru odebíraných vzorků je nezbytné ověřit a definovat podmínky použitelnosti pro jednotlivé dílčí postupy: (i) separace jednotlivých vrstev a analytů, (ii) datování metodou racemizace aminokyselin, (iii) datování pomocí radiokarbonové metody a (iv) izotopovou analýzu pro určení provenience pigmentů. Cílem separačních postupů je získání jednotlivých analytů z vrstev malby, jimiž budou proteiny pro datování pomocí racemizace aminokyselin, lipidy pro radiokarbonové datování a anorganické fáze (olovnatá běloba, jíly s obsahem Nd a Sr) jak pro radiokarbonové datování (CO_3^{2-}), tak pro izotopovou analýzu (Pb, Nd, Sr).

V rámci studia degradací se budeme věnovat především málo prozkoumaným příčinám degradace miniaturních maleb na slonovině a objasnění vlivu zvolené techniky malby na jejich stabilitu. Zjištěné zmydelňování postihující tyto portréty totiž jasně dokládá, že do pojiv byla nutně přidána mastná složka (olej), i když tyto malby byly považovány za akvarelové/kvašové.

Vedle materiálového výzkumu malířských děl bude realizován také průzkum souboru malovaných antických nádob jihoitalské provenience z 5.-3. stol. př.n.l. ze sbírek Ústavu pro klasickou archeologii FF UK. Budou provedeny materiálové komparace jednotlivých produkčních center a budou hledány technologické aspekty výroby a dekorování nádob s ohledem na fázové složení materiálů malby i keramiky (např. teplota výpalu).

Aplikovaný výzkum pro průmysl a ekologii

 *Budeme vyvíjet pokročilé materiály a technologie pro jaderný průmysl, 3D tisk, ekologické stavební směsi i dekontaminaci prostředí.*

V oblasti aplikované anorganické chemie budeme pokračovat ve vývoji:

1. pokročilých konstrukčních materiálů pro jaderný průmysl:
 - materiály na geopolymerní bázi pro jaderný průmysl se stínícími vlastnostmi,
 - dokončení vývoje obalových souborů pro jaderné odpady, zajištění čtvrtprovozní výroby původních „obětních“ materiálů,
 2. systémů pro původní anorganický 3D tisk:
 - budou testovány nové systémy anorganického 3D tisku na bázi laserového protavení anorganických látek a jejich směsí,
 3. ekologických a žárovzdorných pojivových systémů zejména z odpadních surovin jako náhrady cementových pojiv:
 - pokračování ve vývoji vysoce ekologických a žárovzdorných pojivových systémů pro stavebnictví,
 - pokračování ve vývoji materiálů na geopolymerní bázi pro vysokoteplotní tepelná úložiště,
 - pokračovat ve vývoji nových anorganických suspenzí vhodných pro přípravu forem na odlévání kovů a skel,
 4. ekologických řešení:
 - dokončení technologického řešení námi vyvinutého systému pro sanaci zateplených omítek napadených zelenou řasou a černou plísní,
 - zvětšení měřítko přípravy vybraného materiálu na základě oxidu titanu nebo železa pro velké experimenty dekontaminace chemických bojových látek, které se budou blížit reálným podmínkám v terénu,
 - pokračování vývoje technologie výroby granulovaného sorbentu na bázi hydratovaného TiO_2 s využitím pojiv na bázi silikátů a jeho otestování v reálných podmínkách včetně výroby technologického vzorku a všestranné charakterizace.
-

IX. Ochrana životního prostředí



Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí



Jaderná fúze a molekulární borany

Zkoumáme možnosti využití boranů jako čistého paliva pro aneutronickou fúzi.

V době, kdy je potřeba diverzifikovat naše energetické zdroje stále naléhavější, se jeví jaderná fúze slibným výkonným zdroj bezuhlíkové, čisté a bezpečné energie. Společným konceptem aktuálně vyvíjených fúzních elektráren je fúze deuteria a tritia, která je upřednostňována díky relativně velkému účinnému průřezu při nízkých teplotách plazmatu. Během této reakce je však velká část užitečné energie uvolněna ve formě energetických neutronů, které mohou aktivovat komoru fúzního reaktoru a jeho nejbližší okolí. Toto představuje značné technické překážky a bezpečnostní problémy.

K fúzi deuterium-tritium existuje alternativa, která v posledních letech získává na stále větší popularitě – aneutronická fúzní reakce. Tato skupina reakcí představuje čistý zdroj energie bez produkce radioaktivního ionizujícího záření. Mezi těmito aneutronickými reakcemi se nejslibnějším kandidátem jeví fúze protonů s atomy boru vzhledem k relativní dostupnosti boru jako paliva a snadné manipulaci s ním. To vedlo v posledním desetiletí k řadě významných studií a ke vzniku soukromých firem, které chtějí tuto technologii využít.

Mezi hlavní nevyřešené otázky, které v současné době brání efektivnímu využití této fúze, patří (i) pochopení požadavků na laser nezbytný k vytvoření a udržení inerciálního zadržení paliva a zapálení reakce a (ii) lepší pochopení toho, co je vlastně ideální palivo. Náš interdisciplinární projekt je snahou odpovědět na tyto dvě otázky a případně ověřit použití molekulárních borových hydridů (boranů), které obsahují bor společně s vodíkem, jako paliva pro tuto fúzní reakci. Tento projekt vytváří synergický a symbiotický most mezi anorganickou chemií (ÚACH) a fyzikou plazmatu (Ústav fyziky plazmatu).

Mezinárodní vývoj technologií pro čistou vodu



Spolupracujeme na reaktorech pro odstranění polutantů z vod.

V posledním roce řešení mezinárodního projektu GreenWaterTech (Horizon 2020 Co-Funds) jsme se s kolegy ze Švédska (Uppsala University, Swedish University of Agricultural Sciences) a Francie (Ecole Normale Supérieure de Lyon, CNRS Lyon) zaměřili na vývoj modulárního reaktoru s využitím vyvinutých nanomateriálů (nanoabsorbentů a fotokatalyzátorů) pro odstranění emergentních polutantů vod. Při pilotním testování ve Švédsku a v několika společných publikovaných pracích jsme prokázali účinné odstranění mikropolutantů, zejména léčiva, nacházejících se v malých koncentracích v reálných vodách. Na základě pozitivních výsledků budeme spolupracovat v dalším vývoji těchto technologií. Byla také společně připravena další žádost o grant v mezinárodní soutěži s lehce obměněným mezinárodním konsorciem partnerů.

Vývoj materiálů pro ekologické aplikace



Zaměřujeme se na degradaci polutantů a vývoj zelených technologií.

I další materiály vyvíjené na ÚACH, zejména ty na bázi MOFů a Aktivního Boranu, zaměřujeme na environmentální aplikace, jako je odstranění a degradace emergentních a perzistentních polutantů, na kterém úzce spolupracujeme s Fakultou životního prostředí UJEP. V této souvislosti také participujeme na organizaci krajského kola ekologické olympiády středoškolských studentů Ústeckého kraje.

Nové katalytické systémy bez těžkých kovů



Vyvíjíme Lewisovy (super)kyseliny jako alternativu ke klasickým katalyzátorům.

V rámci studia kationtových Lewisových (super)kyselin vyvíjíme nové reakce a reaktivní systémy, které by ve svém katalytickém využití mohly nahrazovat běžně používané ionty těžkých přechodných kovů.

Bezpečnost v jaderném průmyslu



Vyvíjíme materiály pro havarijní záchyt roztaveného paliva.

Pokračovali jsme ve vývoji anorganických „obětních“ materiálů pro jaderný průmysl. Použití obětních materiálů zvyšuje bezpečnost provozu jaderných elektráren, neboť slouží k sanaci roztaveného jaderného paliva při havarijních situacích.

Ekologické betony z odpadních surovin



Přispíváme ke snižování emisí pomocí nízkouhlíkových pojiv.

ÚACH přispívá ke splnění závazků ČR pro snižování emisí skleníkových plynů celkovou nebo částečnou náhradou energeticky náročných portlandských cementů novými ekologickými pojivy připravovanými především z odpadních surovin. Vývojové práce probíhají v rámci uzavřené licenční smlouvy na způsob výroby geopolymerně-pucolánových ekologických betonů.

Vývoj materiálů pro ekologické aplikace



Zaměřujeme se na degradaci polutantů a vývoj zelených technologií.

I další materiály vyvíjené na ÚACH, zejména ty na bázi MOFů a Aktivního Boranu, zaměřujeme na environmentální aplikace, jako je odstranění a degradace emergentních a perzistentních polutantů, na kterém úzce spolupracujeme s Fakultou životního prostředí UJEP. V této souvislosti také participujeme na organizaci krajského kola ekologické olympiády středoškolských studentů Ústeckého kraje.

Ochrana staveb před plísní a řasou



Vyvíjíme technologii pro dlouhodobou sanaci omítek.

Licenční smlouva na technologii přípravy a aplikace prostředků pro z odolnění a sanaci zateplených omítek, napadených zelenou řasou a černou plísní, je před uzavřením.

Úprava pitné vody



Zaměřujeme se na odstranění škodlivin z vody ve spolupráci s odborníky.

Spolu s Ústavem pro hydrodynamiku AV ČR se zaměřujeme na výzkum úpravy pitné vody (odstranění Mn, mikroplastů a organických polutantů).

Ekologicky odpovědný provoz



Minimalizujeme dopady našeho vlastního provozu na životní prostředí.

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.

X. Pracovněprávní vztahy

Aktivity v oblasti pracovněprávních vztahů

Základní personální údaje:

K 31. 12. 2024 bylo v ústavu zaměstnáno 92 fyzických osob; 69,1 FTE
(FTE = Full-Time Equivalent; přepočtený počet zaměstnanců).

Struktura pracovních pozic

Vědečtí pracovníci (5, 4)*: 21,6 FTE

Vědečtí asistenti a postdoktorandi (3a, 3b): 16,6 FTE

Doktorandi (2): 4,2 FTE

Odborní pracovníci (1): 7,9 FTE

SŠ pracovníci ve výzkumných týmech: 5,8 FTE

Pracovníci v technicko-ekonomických a administrativních útvarech: 10,1 FTE

Ostatní: 2,9 FTE

*kategorie 1-5 odpovídají zařazení dle Karierního řádu vysokoškolsky vzdělaných pracovníků AV ČR

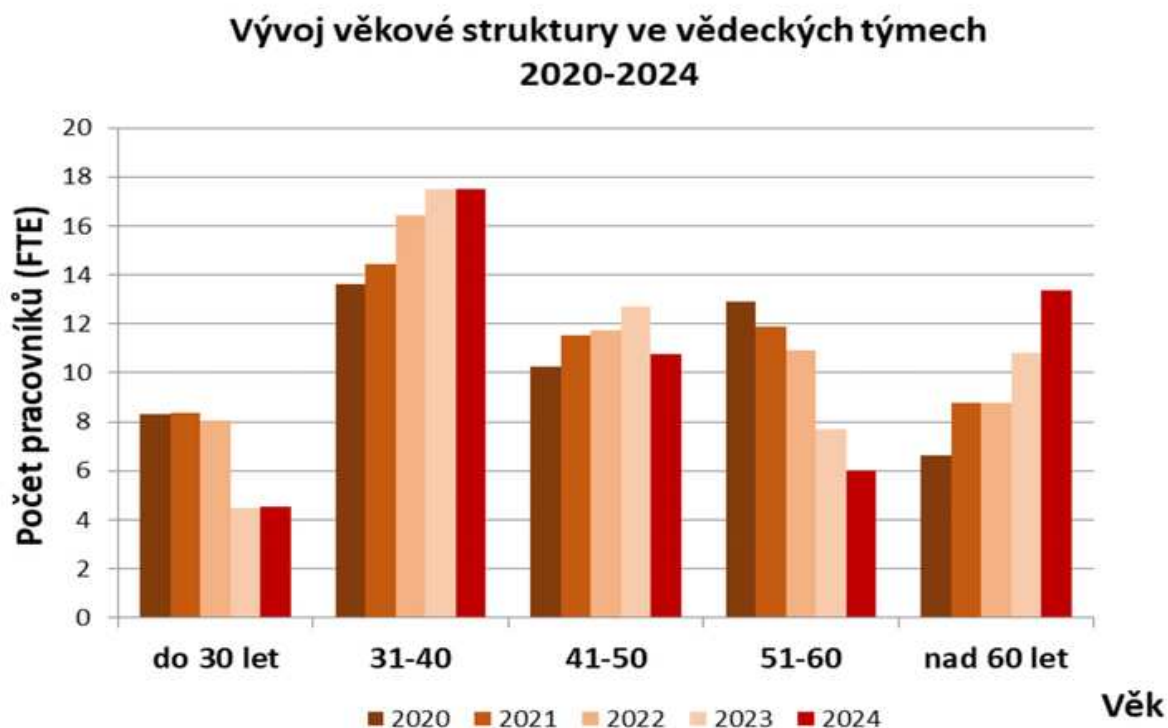


Z uvedené tabulky vyplývá, že cca **81 % pracovní kapacity** zaměstnanců ústavu tvořili **pracovníci ve výzkumných týmech**. Z těchto pracovníků (FTE) mělo 90 % ukončené VŠ vzdělání, z nich bylo 76 % vědeckých pracovníků (získali Ph.D. titul nebo jeho ekvivalent) a 8 % studentů doktorského studia.

V roce 2024 pracovní poměr ukončili 3 pracovníci. Bylo přijato 12 pracovníků, kteří byli zařazeni do výzkumných týmů, z nich 3 doktorandi, 3 postdoktorandi a 2 vědečtí pracovníci. Při přijímání nových pracovníků je kladen důraz především na odbornost, vědeckou úroveň a perspektivu pracovníka.

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

Věková struktura výzkumných pracovníků ústavu je příznivá. V následujícím obrázku je zobrazen vývoj věkové struktury výzkumných pracovníků v letech 2020–2024.



Mzdové prostředky z dotace zřizovatele činily cca 73 % z celkem vyplacených mzdových prostředků. V případě výpočtu průměrné mzdy pouze z dotace zřizovatele by průměrná mzda činila cca 52 000 Kč. Po započítání projektových mzdových prostředků a mzdových prostředků z jiné činnosti, tj. z celkových mzdových prostředků ústavu, průměrná mzda činila 62 152 Kč.



Úsilí vedení ústavu je zaměřeno na rozvoj ústavu a dosažení **excelence v oboru**.

Periodické sledování a **hodnocení produktivity a kvality výsledků** pracovních týmů 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.

XI. Rovné příležitosti

Aktivity v oblasti rovných příležitostí

Zavázali jsme 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. Pracovní skupina pro rovnost žen a mužů působí ve složení Petra Ecorchard, Kamil Lang, Silvie Švarcová a Karel Škoch.

Pozice ombudsoseb zastávají Karel Škoch a Petra Ecorchard. V roce 2024 obdrželi jeden podnět, který společně vyřešili. Obě ombudsosoby udržují aktivní kontakty a pravidelně sdílí zkušenosti s ombudsosobami z dalších ústavů Akademie věd.

Dbáme na to, aby nově vzniklé směrnice a dokumenty byly napsány genderově senzitivním jazykem, neobsahujícím generické maskulinum. Stejný princip je uplatňován i v psané komunikaci uvnitř pracoviště (informace, příkazy, výzvy apod.), je-li určena všem pracujícím nebo různorodé skupině pracujících, a v inzerátech na výběrová řízení.

Rada ústavu projednala nový **Etický kodex vědecko-výzkumné činnosti** v ÚACH (IP č. 131 platný od 18. 12. 2024, dále jen Etický kodex), který rozšiřuje zásady chování ke spolupracovníkům a spolupracovnicím o problematiku šikany a sexuálního obtěžování v souladu s novým Etickým kodexem vědecko-výzkumné činnosti v Akademii věd ČR a Kodexem chování v Akademii věd ČR. Etický kodex také upravuje postup při řešení případů porušování zásad etického chování ve vědecko-výzkumné práci a vymezuje případy, které náleží do kompetence ombudsoseb. Rada ústavu dále projednala IP č. 132 Definice a jednací řád Etické komise ÚACH.

V souladu s přijatým Plánem rovnosti žen a mužů ÚACH zveřejňuje ústav ve svých výročních zprávách agregovaná statistická data o zastoupení mužů a žen ve výzkumných týmech, ve vedoucích pozicích a v orgánech ústavu, při podávání grantových návrhů a jejich získávání a údaje o poměru mužů a žen nastupujících/opouštějících ÚACH.

Zastoupení mužů a žen (M/Ž):

- Výzkumní pracovníci: 34/16
- Rada ústavu: 8/4
- Dozorčí rada: 4/0
- Vedoucí pozice: 6/2
- Navázání pracovního poměru: 2/1
- Ukončení pracovního poměru: 8/4
- Podávání grantových návrhů: 25/5
- Získání grantových návrhů: 8/2



XII. Přístup k informacím

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

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



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

250 68 Husinec-Řež

Výroční zpráva o poskytování informací za rok 2024

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: **Nebyla podána žádná žádost, která by byla předmětem ochrany autorského práva a vyžadovala poskytnutí licence.**
7. Počet stížností podaných podle § 16a zákona č. 106/1999 Sb., důvody jejich podání a stručný popis způsobu jejich vyřízení: **Nebyla podána žádná stížnost.**
8. Další informace vztahující se k uplatňování tohoto zákona: **0**

Výroční zpráva ÚACH o poskytování informací podle zákona je začleněna do Výroční zprávy o činnosti a hospodaření ÚACH za rok 2024 jako její samostatná část s názvem „Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb. o svobodném přístupu k informacím“.

V Řeži dne: 18. února 2025

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

XIII. Přílohy

- účetní závěrka a zpráva o jejím auditu

V Řeži dne:

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