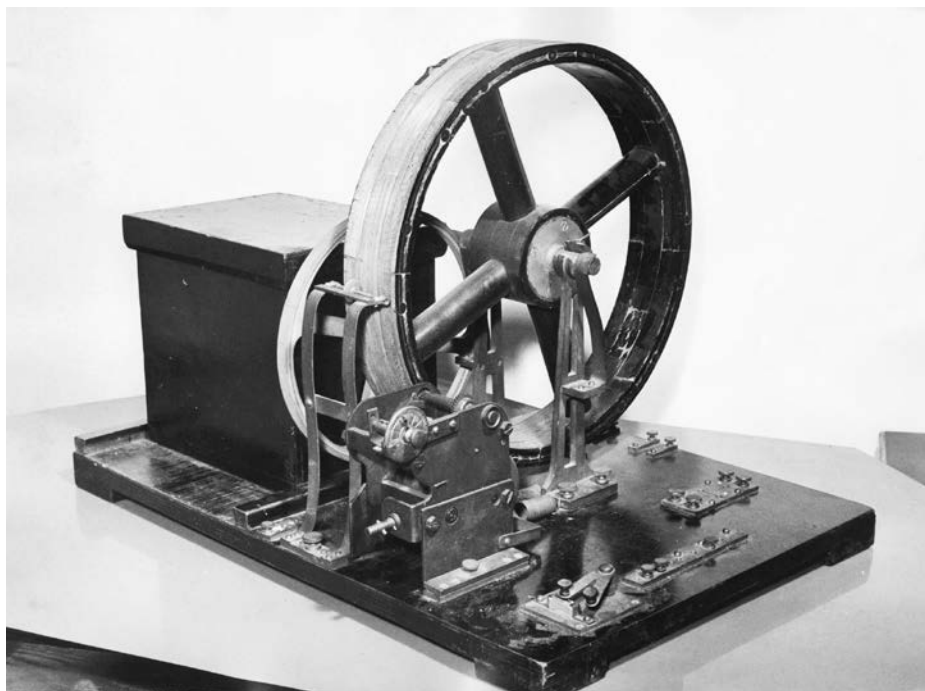




VÝROČNÍ ZPRÁVA

O ČINNOSTI A HOSPODAŘENÍ ZA ROK 2018

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

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

IČ: 61388955

Sídlo: Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8

Dozorčí radou instituce projednána dne: : 31. května 2019

Radou instituce schválena dne 20. června 2019

V Praze dne 21. června 2019

Obsah

I. Informace o složení orgánů veřejné výzkumné instituce a o jejich činnosti	4
A) Výchozí složení orgánů pracoviště	4
Ředitel instituce.....	4
Rada instituce.....	4
Dozorčí rada.....	5
B) Změny ve složení orgánů	5
C) Informace o činnosti orgánů:	5
Ředitel instituce.....	5
Rada instituce.....	6
Dozorčí rada.....	10
II. Informace o změnách zřizovací listiny.....	11
III. Hodnocení hlavní činnosti.....	12
III.1. Nejvýznamnější výsledky.....	12
Oddělení biofyzikální chemie.....	13
Oddělení nízkodimenzionálních systémů	14
Oddělení dynamiky molekul a klastrů.....	15
Oddělení struktury a dynamiky v katalýze	16
Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy	17
Oddělení elektrochemie v nanoměřítku	18
Oddělení elektrochemických materiálů	19
Oddělení spektroskopie	20
Oddělení teoretické chemie	21
Oddělení chemie iontů v plynné fázi	22
Nejvýznamnější publikace:	23
III.2 Výzkumné projekty	27
Významné projekty a strategie ústavu	27
III.3. Ocenění.....	28
III.4. Propagace a popularizace	30
III.5. Vědecká a pedagogická spolupráce pracoviště s vysokými školami.....	51
III.6. Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou	52
Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané řešením projektů.....	52
Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané na základě smluv.....	54
Společné projekty výzkumu a vývoje podpořené z veřejných prostředků:.....	55

Informace o zaměstnancích pracoviště, kteří zastávali funkce v řídicích orgánech významných mezinárodních vědeckých organizací.....	56
III.7. Mezinárodní vědecká spolupráce	58
Projekty financované Evropskou komisí v programu a HORIZONT 2020:	58
Mezinárodní projekty, které byly řešené v rámci mezinárodní vědecké spolupráce mimo rámcových programů EU	59
III.8. Konference a zahraniční hosté.....	60
Konference s mezinárodní účastí:	60
Významné vědecké akce na národní úrovni, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spolupořadatel:	61
Zahraníční hosté ústavu:.....	62
IV. Hodnocení další a jiné činnosti: Ekonomické oddělení.....	63
V. Informace o opatřeních k odstranění nedostatků v hospodaření a zpráva, jak byla splněna opatření k odstranění nedostatků uložená v předchozím roce:	63
VI. Finanční informace o skutečnostech, které jsou významné z hlediska posouzení hospodářského postavení instituce a mohou mít vliv na její vývoj	64
VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště.....	64
VIII. Aktivita v oblasti ochrany životního prostředí.....	65
IX. Aktivita v oblasti pracovních právních vztahů-oddělení ekonomické dodat	65
X. Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb. , o svobodném přístupu k informacím	66

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

A) Výchozí složení orgánů pracoviště

Ředitel instituce

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

Jmenován s účinností od: 1. 5. 2017

Rada instituce

zvolena dne:

23. 1. 2017 ve složení:

Předseda:

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

Místopředseda:

prof. RNDr. Ladislav Kavan, DSc.

Interní členové (ÚFCH JH)

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

Mgr. Michal Horáček, Ph. D.

Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat.

Prof. RNDr. Zdeněk Samec, DrSc.

Mgr. Jiří Dědeček, CSc. DSc.

RNDr. Martin Ferus, Ph.D.

Mgr. Magdaléna Hromadová, Ph. D.

RNDr. Ing. Martin Kalbáč, Ph. D.

Externí členové:

Prof. RNDr. Jiří Barek, CSc.

Přírodovědecká fakulta University Karlovy v Praze

Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Fakulta chemické technologie Vysoké školy
chemicko-technologické v Praze

Prof. RNDr. Eva Tesařová, CSc.

Přírodovědecká fakulta University Karlovy v Praze

Prof. Mgr. Pavel Jungwirth, DSc.

Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR

Prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka, Fakulta chemického-
inženýrství Vysoké školy chemicko-technologické
v Praze

Dozorčí rada

Předseda:	Ing. Petr Bobák, CSc., člen Akademické rady Akademie věd České republiky
Místopředseda:	RNDr. Jan Hrušák, CSc., Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, AV ČR, v. v. i.
Členové:	Ing. Zbyněk Černý, CSc. Ústav anorganické chemie, AV ČR, v. v. i. prof. Ing. Jiří Homola, DSc. Ústav fotoniky a elektroniky, AV ČR, v. v. i. doc. Mgr. Iva Matolínová, Dr. Matematicko-fyzikální fakulta UK

B) Změny ve složení orgánů

V roce 2018 neproběhly žádné změny ve složení orgánů

C) Informace o činnosti orgánů:

Ředitel instituce

Hlavní aktivity ředitele v řízení instituce:

- a) organizace jednání kolegia ředitele, které se v roce 2018 konalo celkem 13x; závěry z jednání jsou zveřejněny na interních webovských stránkách ústavu,
- b) předložení návrhu rozpočtu na rok 2018 Dozorčí radě k vyjádření a Radě instituce ke schválení,
- c) předložení Výroční zprávy o činnosti a hospodaření za rok 2017 po ověření účetní závěrky auditorem Dozorčí radě k vyjádření a Radě instituce ke schválení,
- d) podání návrhů na Prémii Otto Wichterleho, Hlávkovu cenu a Premium Academiae,
- e) předložení návrhů k úkonům vyžadujícím předchozí souhlas Dozorčí rady této radě ke schválení,
- f) příprava a uzavření dodatku Kolektivní smlouvy s Odborovou organizací týkajícího se zásad a rozpočtu čerpání ze sociálního fondu v roce 2018,
- g) přijetí nových pracovníků na základě konkurzního řízení a rozhodnutí o prodloužení nebo novém zařazení pracovníků ústavu na základě jejich atestace,
- h) organizace 28. Brdičkovy přednášky,

- ch) jmenování orgánů pro proces implementace Human Resources Strategy for Researchers (HRS4R) v souvislosti s oceněním „HR Excellence in Research Award“
- i) jmenování komisí včetně Etické komise pro výzkum zahrnující lidské subjekty, atestační komise, investiční komise a jmenování mezinárodního poradního sboru (International Advisory Board),
- j) zřízení statutu emeritního vědeckého pracovníka ÚFCH JH.

Rada instituce

V roce 2018 se jednání Rady instituce uskutečnilo celkem 25 krát, z toho 21 jednání proběhla formou hlasování per rollam.

4. Zasedání RI (28. 02. 2018)

- Rada schválila zápis a usnesení z 3. zasedání RI (z 27. 9. 2017)
- 0,- Rada schválila zápisy a usnesení z hlasování per rollam (z 3. 10. 2017, 24. 10. 2017, 6. 11. 2017, 14. 11. 2017, 29. 11. 2017, 20. 12. 2017, 10. 01. 2018 a 9. 2. 2018)
- RI ukládá vedení Ústavu vypracování analýzy možného posunu jak spodních, tak horních hranic mezd v tabulce Tarifního rozpětí tříd uvedených v příloze 1 Vnitřního mzdového předpisu ÚFCH JH.
- Rada instituce vyzývá vedoucí oddělení, aby zvážili nominaci vhodných kandidátů FS JEP podle daných pravidel tak, aby kandidát mohl v červnu uspořádat seminář pro členy RI.

5. Zasedání RI (15. 6. 2018)

- Rada schválila zápis a usnesení ze 4. zasedání RI (z 28. 2. 2018)
- Rada schválila zápisy a usnesení z hlasování per rollam ze dnů 22. 03. 2018, 26. 03. 2018, 04. 04. 2018, 18. 04. 2018, 25. 04. 2018, 10. 05. 2018, 21. 5. 2018, 28. 5. 2018 a 6. 6. 2018.
- Rada schválila, že se bude rozpočet Ústavu v příštích letech schvalovat na řádném zasedání RI.
- RI schvaluje změnu Vnitřního mzdového předpisu, a stanovuje tarifní rozpětí mzdy pro vědecké pracovníky takto:

	dolní hranice	horní hranice
V1	17000	28000
V2	20000	28000
V3	22000	29000
V4	24000	30000
V5	26000	35000
V6	28000	50000

- RI schvaluje změnu znění odstavce (2) článku 9. Vnitřního mzdového předpisu takto:

(2) Zaměstnanci, který dlouhodobě dosahuje velmi dobrých pracovních výsledků, může zaměstnavatel na návrh přímého nadřízeného poskytovat osobní příplatek až do výše

- a) 100 % přiznané tarifní mzdy v tarifní třídě O1 – O5
- b) 200 % přiznané tarifní mzdy v tarifní třídě V1 – V6
- c) 200 % přiznané tarifní mzdy a až 17 tisíc Kč měsíčně zaměstnanci v tarifní třídě V2 – V6, který se podílí na řešení projektů financovaných Evropskou Komisí a dalších mezinárodních projektů

Tento osobní příplatek je nenárokovou složkou, a může být na písemnou odůvodněnou žádost vedoucího oddělení zkrácen nebo odňat.

- RI ukládá kolegiu ředitele vypracovat nový vnitřní mzdový předpis tak, aby mohl být schválen na příštím řádném zasedání RI a mohl vstoupit v platnost od 1. 1. 2019.
- Rada instituce schvaluje Výroční zprávu ÚFCH JH za rok 2017.
- Rada instituce souhlasí se zřízením Etické komise na ÚFCH JH.
- Rada instituce schvaluje znění dokumentů „Jednací řád Etické komise pro výzkum Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.“ a „Statut Etické komise pro výzkum Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.“, v předloženém znění.
- Rada instituce ukládá rozšířenému kolegiu ředitele, aby připravilo návrh Interního předpisu k dlouhodobé strategii výzkumné činnosti v návaznosti na koncepci ÚFCH JH, a to v termínu, který by umožnil platnost nového dokumentu k 1. 1. 2019
- Rada instituce doporučuje předložení do veřejné soutěže GAČR všech pěti návrhů projektů EXPRO

6. Zasedání RI (03. 09. 2018)

- Rada doporučuje podání návrhu na udělení prémie pro perspektivní výzkumné pracovníky - Lumina quaeruntur, pro Ing. V. Petrákovou, Ph.D.
- Rada schvaluje zápis a usnesení 5. zasedání RI ze dne 15. 06. 2018
- Rada schvaluje zápisy a usnesení z hlasování per rollam ze dnů 18. 06. 2018 a 20. 8. 2018
- Rada schvaluje zřízení pozic emeritních vědeckých pracovníků Ústavu
- Rada souhlasí se slučováním infrastruktur CEITEC Nano, LNSM a NanoEnviCZ do konsorcia NanoLabCZ

7. Zasedání RI (06. 12. 2018)

- Rada schválila zápis a usnesení z 6. zasedání RI (z 3. 9. 2018)
- Rada schválila zápisy a usnesení z hlasování per rollam ze dnů ze dnů 6. 9. 2018, 19. 9. 2018, 26. 9. 2018, 3. 10. 2018, 22. 10. 2018, 5. 11. 2018, 19. 11. 2018
- Rada schválila Organizační řád v předloženém znění s následujícími připomínkami: název nového oddělení bude „Oddělení nanokatalýzy“, název nového oddělení bude

„Oddělení výpočetní chemie“, název nově vzniklé skupiny bude „skupina emeritních vědeckých pracovníků“, bod 8.5.1 OŘ bude znít: Útvar ředitele tvoří sekretariát ředitele, knihovna a skupina emeritních vědeckých pracovníků, v příloze č. 1 je třeba upravit pořadí jednotlivých vědeckých oddělení do pořadí, které bude odpovídat číselnému označení jednotlivých oddělení v tomto organizačním schématu. Na dokumentu bude uvedeno aktuální logo ÚFCHJH účinnost dokumentu od 1. 1. 2019

- Rada pro účely hodnocení vědecké práce navrhuje ustanovení mezinárodního expertního panelu jako poradního orgánu ředitele, který nebude totožný s IAB

- Rada schválila Vnitřní mzdový předpis v předloženém znění s následujícími připomínkami: nové znění Článku IX – osobní příplatek, bodu 9.2, písm. c) bude: c) 200 % přiznané tarifní mzdy a až 17 000 Kč měsíčně zaměstnanci v tarifní třídě V2 až V6, který se podílí na řešení projektů financovaných Evropskou komisí a dalších významných mezinárodních projektů. Účinnost dokumentu od 1. 1. 2019

- Rada schválila Volební řád ÚFCHJH s tím, že Příloha č. 1 – pravidla pro volbu členů Rady instituce bude upřesněna před příští volbou RI. Účinnost dokumentu od 1. 1. 2019

- Rada bere na vědomí text dokumentu Akční plán HR Excellence in Research

- Rada schválí dokument Strategy of research activities v rámci hlasování per rollam po doplnění textu

Rada instituce schválila per rollam následující usnesení:

- Rada instituce doporučuje podání žádosti grantového projektu CheMBA i žádosti grantového projektu Understanding electro-catalytic CO₂ conversion via operando techniques, oba v rámci soutěže Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Networks (10. 1. 2018)

- Rada instituce doporučuje podat žádost grantového projektu Energy-X: Transformative chemistry for sustainable energy future i žádost grantového projektu SUNRISE: Solar energy for a circular economy, oba v rámci soutěže FET FLAGSHIP, doporučuje podání projektu Electron-triggered molecular transformation (TRIGGER) v rámci soutěže CALL FOR PROPOSALS FOR ERC CONSOLIDATOR GRANT a doporučuje podání projektu Active sites in zeolite catalysts. DFT and multi-spectroscopic analysis v rámci soutěže Výzva k podání rakousko-českých návrhů projektů v základním výzkumu (9. 2. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání následujících návrhů na ocenění:

- tým ve složení: M. Amaro, Ph.D., Mgr. M. Cebecauer, Ph.D., prof. M. Hof, Dr. rer. nat. DSc., RNDr. R. Šachl, Ph.D., Mgr. J. Sýkora, Ph.D., Mgr. P. Jurkiewicz, Ph.D., za Development of novel fluorescence approaches for bio-sciences na Cenu Akademie věd České republiky za mimořádné výsledky výzkumu, experimentálního vývoje a inovací

- Mgr. Jaroslava Kočiška, Ph.D. na Cenu Akademie věd České republiky pro mladé vědecké pracovníky za vynikající výsledky výzkumu, experimentálního vývoje a inovací

- prof. RNDr. Z. Samce, DrSc. na ocenění Čestnou oborovou medailí Jaroslava Heyrovského za zásluhy v chemických vědách (22. 3. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání všech předložených grantových návrhů GAČR a TAČR

- Rada souhlasí s nominací Mgr. Jaroslava Kočiška, Ph.D., na „Prémii Otto Wichterleho“ (26. 3. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání obou předložených grantových návrhů GAČR (4. 4. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání všech čtyř předložených grantových návrhů Inter-excellence, podprogramu Inter-action LTAUSA18, poskytovatel MŠMT a návrhu grantového projektu soutěže Podpora regionální spolupráce krajů a ústavů AV ČR.

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

1.) Mgr. Petra Riegerová, Ph.D.

2.) Mgr. Radek Žouželka

3.) Mgr. Zuzana Melníková, Ph.D. (18. 4. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání předloženého grantového návrhu (25. 4. 2018)

- Rada instituce schvaluje předložený rozpočet ÚFCHJH na rok 2018 (10. 5. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání grantového návrhu MŠMT

- Rada instituce souhlasí s uzavřením předložené smlouvy o ustanovení Národního centra kompetence chemie („NCK - chemie“) a s aktivní účastí ÚFCHJH na řešení projektu Centra

- Rada instituce souhlasí s uzavřením předložené Smlouvy o spolupráci mezi ÚFCHJH a Hvězdárnou Valašské Meziříčí, včetně dodatku č. 1 Smlouvy o spolupráci (21. 5. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání všech třech předložených grantových návrhů (28. 5. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání předloženého grantového návrhu (6. 6. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání všech devíti předložených grantových návrhů (18. 6. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání předloženého grantového návrhu (20. 8. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání všech třech předložených grantových návrhů (6. 9. 2018)

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

1.) Mgr. Petra Riegerová, Ph.D.

2.) Mgr. Radek Žouželka, Ph. D.

3.) Mgr. Zuzana Melníková, Ph.D. (19. 9. 2018)

- RI souhlasí se jmenováním mezinárodního poradního sboru (International Advisory Board) v tomto složení:

prof. Ulrike Diebold

prof. Dr. Joachim Heberle

prof. Dr. Timo Jacob

prof. Philipp Kukura

prof. Ing. Peter Rapta, DrSc.

Na 5 leté funkční období do roku 2023 (26. 9. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání všech třech předložených návrhů grantových projektů (3. 10. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání všech předložených grantových návrhů

- Rada instituce souhlasí s uzavřením předloženého Memoranda o porozumění o spolupráci v oblasti aplikovaného výzkumu mezi ÚFCHJH a Spolanou, a.s. (22. 10. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání všech třech předložených grantových návrhů

- Rada instituce souhlasí s odesláním „Akčního plánu“ vypracovaného na ÚFCHJH pro účely získání statutu „HR Excellence in Research“ na základě zavedení programu "Human Resources Strategy for Researchers (HRS4R)" Evropské Komisi do 15. 11. 2018 (5. 11. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání obou předložených grantových návrhů (19. 11. 2018)

- Rada instituce doporučuje podání obou předložených grantových návrhů

- Rada instituce schvaluje dokument Strategy of research activities (17. 12. 2018)

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

Dozorčí rada

V roce 2018 proběhla zasedání Dozorčí rady Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., dne 11. 6. 2018 a tři jednání per rollam k datům 25. 5. a 22. 11. 2018.

Zasedání DR dne 11. 6. 2018

DR souhlasí s návrhem rozpočtu ÚFCH JH na rok 2018.

DR souhlasí s Výroční zprávou o činnosti a hospodaření za rok 2017.

DR bere na vědomí Zprávu nezávislého auditora o ověření účetní uzávěrky za rok 2017.

DR schvaluje Zprávu o činnosti DR za rok 2017.

DR určuje auditora pro ověření účetní uzávěrky za rok 2018 dle Smlouvy o provedení auditu Ing. L. Ježka (sídlo Šafaříkova 201/17, 1200 Praha 2, bydl. U Školky 560, 46841 Tanvald).

Dozorčí rada schválila per rollam následující usnesení:

1) DR schvaluje dle předloženého návrhu hodnocení manažerských schopností ředitele ÚFCH JH Prof. Martina Hofa,

Schválení proběhlo formou per rollam č. 42 k datu 25. 5. 2018.

2) DR souhlasí se Smlouvou o nájmu prostoru sloužícího podnikání s firmou Three Bond Co., Ltd., odštěpný závod, Družstevní 2, 273 51 Pletený Újezd.

Uzavřená na základě dohody smluvních stran podle ustanovení §2302 zákon č.89/2012 Sb., občanský zákoník v platném znění.

Schválení proběhlo formou per rollam č. 43 k datu 22. 11. 2018.

3) DR souhlasí s Nákupem investice -Výbuchové komory -pro projekt CARAT .

(reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_026/0008382).Poskytovatel MŠMT projekt OP VVV .

Schválení proběhlo formou per rollam č. 44 k datu 22. 11. 2018.

Všichni členové Dozorčí rady podepsali během měsíce března 2019 čestné prohlášení, o tom že si nejsou vědomi toho, že by oni či jejich rodinní příslušníci byli účastní v osobách, s nimiž účetní jednotka, Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., uzavřel za účetní období 1. 1. 2018 – 31. 12. 2018 obchodní smlouvy nebo jiné smluvní vztahy.

II. Informace o změnách zřizovací listiny

Ve Zřizovací listině nebyly v roce 2018 učiněny žádné změny.

III. Hodnocení hlavní činnosti

V souladu s platnou zřizovací listinou ústav uskutečňuje vědecký výzkum v oblasti **fyzikální chemie, elektrochemie, analytické chemie a chemické fyziky** a vyhledává možnosti využití jeho výsledků.

Podle platné zřizovací listiny ve znění dodatku ze dne 22. června 2010 je předmětem hlavní činnosti ÚFCH JH vědecký výzkum ve fyzikální chemii, elektrochemii, analytické chemii a chemické fyzice, a to zejména výzkum struktury látek a jejich vlastností, výzkum elementárních dějů chemických reakcí a procesů, výzkum chemických a fyzikálně-chemických procesů v homogenní fázi a na rozhraní fází, příprava a vývoj chemických sloučenin, materiálů a technologií, vývoj speciálních fyzikálních a fyzikálně-chemických metod a zařízení a vývoj počítačových programů pro kvantově-chemické a další teoretické výpočty v oborech činnosti pracoviště a pro řízení experimentů a zpracovávání jejích výsledků. Svou činností ÚFCH JH přispívá ke zvyšování úrovně poznání a vzdělanosti a k využití výsledků vědeckého výzkumu v praxi. Získává, zpracovává a rozšiřuje vědecké informace, vydává vědecké publikace (monografie, časopisy, sborníky apod.), poskytuje vědecké posudky, stanoviska a doporučení a provádí konzultační a poradenskou činnost. Ve spolupráci s vysokými školami uskutečňuje doktorské studijní programy a vychovává vědecké pracovníky. Pořádá pro studenty přednáškové kurzy, cvičení a praktika. V rámci předmětu své činnosti rozvíjí mezinárodní spolupráci, včetně organizování společného výzkumu se zahraničními partnery, přijímání a vysílání stážistů, výměny vědeckých poznatků a přípravy společných publikací. Pořádá domácí i mezinárodní vědecká setkání, konference, semináře a přednášky a zajišťuje infrastrukturu výzkumu, včetně poskytování ubytování svým zaměstnancům a hostům a zajišťování závodního stravování v jídelně areálu AV ČR Mazanka pro pracovníky pracovišť Akademie věd ČR. Úkoly realizuje samostatně i ve spolupráci s vysokými školami a dalšími vědeckými a odbornými institucemi.

Ústav v roce 2018 pokračoval v teoretickém i experimentálním výzkumu ve vybraných oblastech chemické fyziky, elektrochemie, katalýzy a přílehlých oborů. Výzkumná činnost probíhá v 10 odděleních a 2 centrech.

III.1. Nejvýznamnější výsledky

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

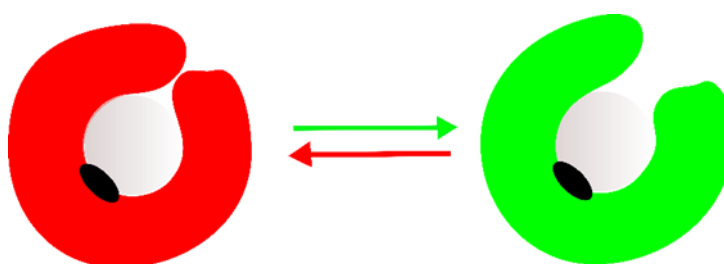
(První tři výsledky přehledu byly zahrnuty jako nejvýznamnější výsledky pracoviště do podkladů pro Výroční zprávu Akademie věd ČR za rok 2018).

Oddělení biofyzikální chemie

Dynamika otvírání a zavírání enzymu sledovaná v reálném čase

Ukázali jsme, že dynamika proteinu výrazně ovlivňuje enzymatickou aktivitu. Pomocí fluorescenční korelační spektroskopie jsme sledovali dynamiku otvírání a zavírání enzymu v reálném čase. V kombinaci s měřením kinetiky a počítačových simulací jsme popsali rovnováhu mezi dvěma formami enzymu dehalogenázy. Otevřená forma umožňuje účinný transport substrátu a produktu, zatímco zavřená forma je prospěšná pro samotnou chemickou reakci. Rychlé přeskupování mezi těmito formami připomínající činnost vrátek je důležitým faktorem pro návrh vysoce účinných biokatalyzátorů.

Spolupracující subjekt: Masarykova Univerzita, Brno, Česká republika



Dynamika enzymu spočívající v přechodu mezi zavřenou a otevřenou konformací. Schéma enzymu dehalogenázy, který může zaujmout dvě různé konformace. Zavřená konformace (znázorněná červeně) je výhodná pro chemickou přeměnu substrátu na produkt. Otevřená konformace (znázorněná zeleně) je potom účinná pro transport substrátu k aktivnímu místu (znázorněné černě) a uvolnění produktu zpět do roztoku. Rychlý přechod mezi těmito dvěma stavy zajišťuje vysokou aktivitu studovaného enzymu. Tento mechanismus připomínající zavírání a otvírání vrátek by proto měl být zohledněn při navrhování nových vysoce účinných biokatalyzátorů.

Kokkonen P., Sykora J., Prokop Z., Ghose A., Bednar D., Amaro M., Beerens K., Bidmanova K., Slanska M., Brezovsky J., Damborsky J., Hof M., Molecular Gating of an Engineered Enzyme Captured in Real Time, **J. Am. Chem. Soc.**, 2018, 140 (51), pp 17999–18008.

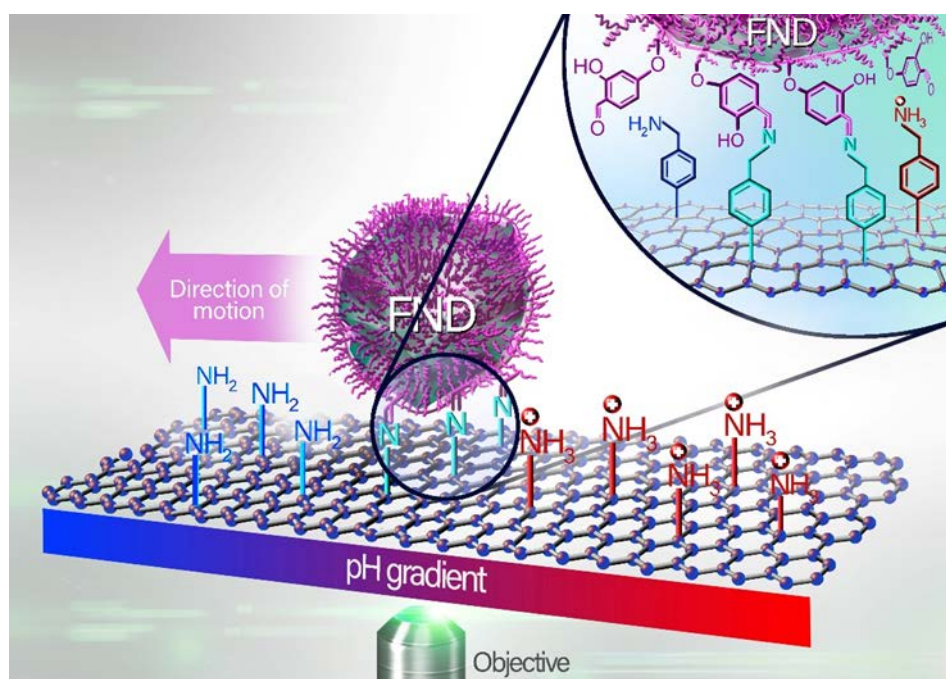
DOI: 10.1021/jacs.8b09848

Oddělení nízkodimenzionálních systémů

Orientovaný pohyb nanodiamantů připojených na grafen pomocí dynamických kovalentních vazeb v gradientu pH

Kontrolovaná manipulace s nanoskopickými objekty externími stimuly je svatý grál nanověd. Využili jsme dynamické kovalentní chemie k reversibilnímu vázání a orientovanému pohybu částic fluorescenčního nanodiamantu na povrchu funkcionizovaného grafenu pomocí multivalentních iminových vazeb v gradientech pH při sledování v reálném čase fluorescenční mikroskopií. Tato práce otvírá možnosti termodynamicky kontrolované manipulace s nanoskopickými objekty ve dvou dimenzích.

Spolupracující subjekt: Ústav organické chemie a biochemie AVČR, Univerzita Karlova, Université de Strasbourg (Francie)



Orientovaný pohyb nanodiamantů připojených na grafen pomocí dynamických kovalentních vazeb v gradientu pH. *Kontrolovaná manipulace s nanoskopickými objekty externími stimuly je svatý grál nanověd. Využili jsme dynamické kovalentní chemie k reversibilnímu vázání a orientovanému pohybu částic fluorescenčního nanodiamantu na povrchu funkcionizovaného grafenu pomocí multivalentních iminových vazeb v gradientech pH při sledování v reálném čase fluorescenční mikroskopií. Tato práce otvírá možnosti termodynamicky kontrolované manipulace s nanoskopickými objekty ve dvou dimenzích.*

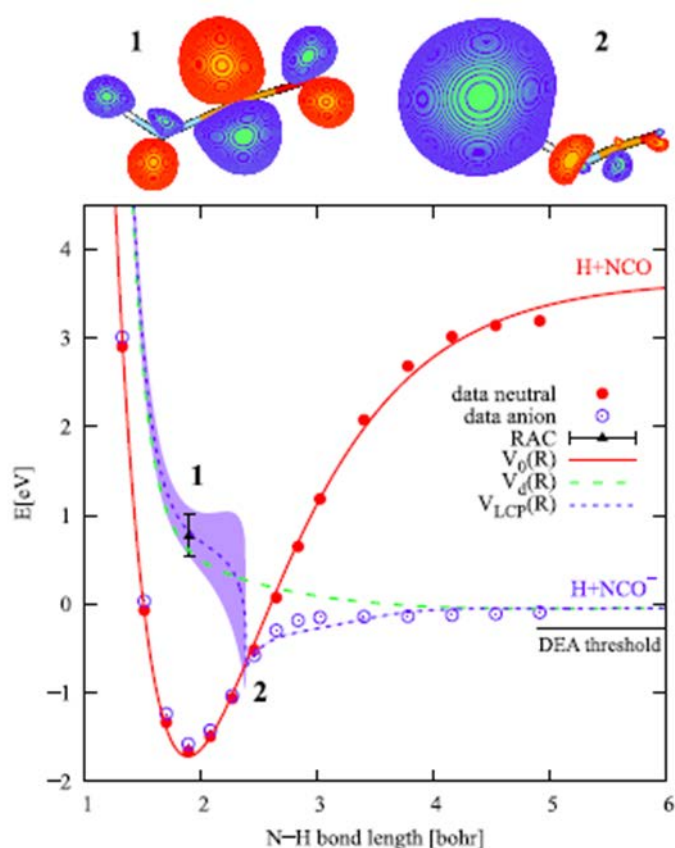
Kovaříček, P.; Cebecauer, M.; Neburková, J.; Bartoň, J.; Fridrichová, M.; Drogowska, K. A.; Cigler, P.; Lehn, J.-M.; Kalbac, M. Proton-Gradient-Driven Oriented Motion of Nanodiamonds Grafted to Graphene by Dynamic Covalent Bonds, *ACS Nano*, 2018, 12, 7141–7147.

Oddělení dynamiky molekul a klastrů

Rezonance a disociativní elektronový záchyt v HNC O^-

Zkoumali jsme rozklad kyseliny isokyanaté, HNC O^- , nízkoeenergetickými elektrony. Experimentální absolutní účinný průřez pro NCO $^-$ fragment vykazuje ostrý nárůst a struktury blízko energetického prahu. Rezonanční stav má smíšenou symetrii a velice nezvykle se chová závislost šířky na molekulární geometrii. Nelokální teoretický model zkonstruovaný na bázi tohoto stavu souhlasil s experimentem velice dobře. Tato molekula je prototypní systém pro interpretaci disociativního elektronového záchytu v řadě polyatomových molekul.

Spolupracující subjekt: Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Institute of Theoretical Physics, V Holešovičkách 2, 18000 Prague, Czech Republic



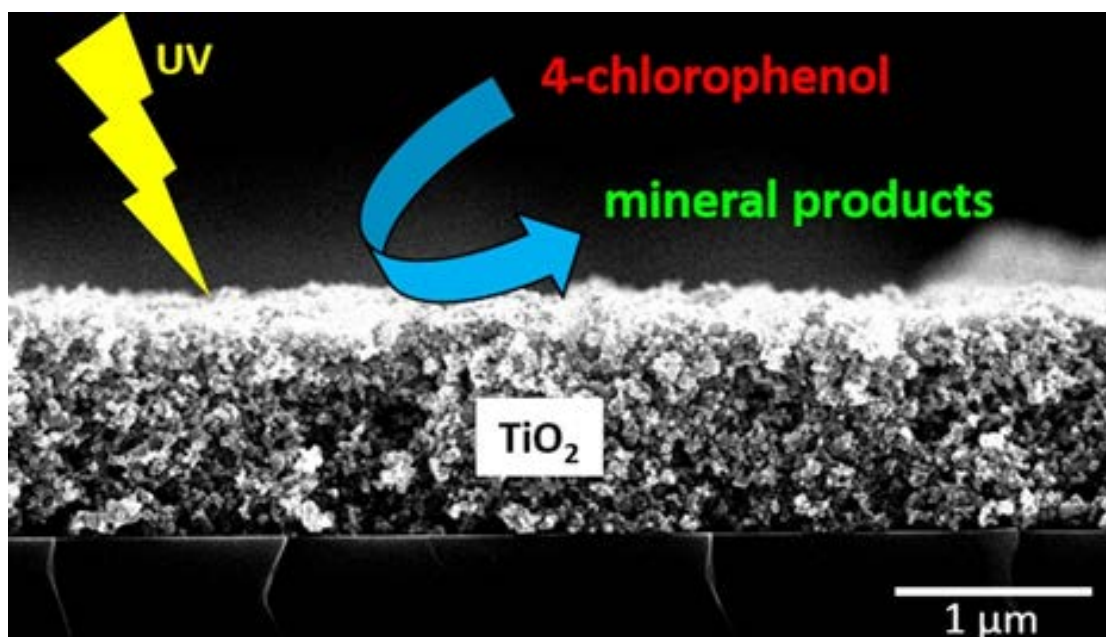
Křivky potenciální energie, které hrají roli v rozkladu HNC O^- . Průřez povrchem potenciální energie podél N-H vazby. Modrá křivka znázorňuje rezonanční stav aniontu. Takový tvar – zvláště se měnící šířka – nebyl dosud v žádném jiném systému znám. Je způsoben náhlou změnou charakteru vlnové funkce, znázorněnou na vrchním panelu.

M. Zawadzki, M. Čížek, K. Houfek, R. Čurík, M. Ferus, S. Civiš, J. Kočišek, J. Fedor, Resonances and dissociative electron attachment in HNC O^- , *Phys. Rev. Lett.*, 2018, 121, 14302.

Oddělení struktury a dynamiky v katalýze

Vrstvy TiO_2 připravené kvantitativní elektroforetickou depozicí jako účinné fotokatalyzátory pro čištění vody

Vyvinuli jsme metodu elektroforetické depozice, která umožňuje kvantitativně nanášet široký rozsah práškovitých materiálů (jako TiO_2 , ZnO nebo SiO_2) na vodivé substráty bez použití aditiv, což zajišťuje jejich efektivní využití materiálu bez ztrát. Pomocí původních vrstev TiO_2 bylo dosaženo vysoké účinnosti odbourávání toxických chlorfenolů a jejich úplné mineralizace. Tato vlastnost má zásadní význam pro aplikaci fotokatalýzy při čištění vody.



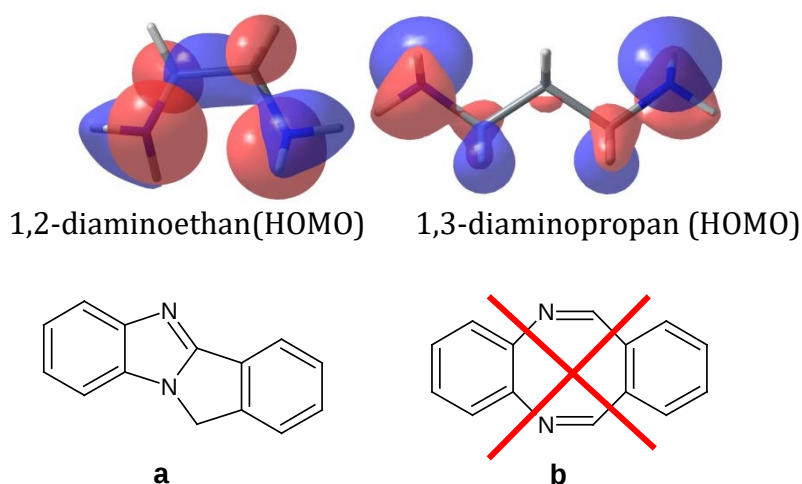
Fotokatalytický proces odstraňování chlorovaných fenolů z vody. Po ozáření porézní vrstvy TiO_2 dochází ke generaci účinných radikálů. Tyto radikály napadají molekuly znečišťující látky rozpuštěné ve vodě a účinně ji mineralizují na vodu a oxid uhličitý

Radek Zouzelka, Monika Remzova, Libor Brabec, Jiri Rathousky: Photocatalytic performance of porous TiO_2 layers prepared by quantitative electrophoretic deposition from organic solvents, [Applied Catalysis B: Environmental](#), 2018, 227, 70-78.

Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy

Reaktivita ftalaldehydu s diaminy

Elektrochemické studium reakce ftalaldehydu (benzen-1,2-dicarboxaldehyd, OPA) s osmi primárními diaminy přineslo dva z hlediska mechanismu důležité výsledky: 1) Reakce vicinálních (1,2-) diaminů je zcela odlišná od ostatních (1,3-, ..., α,ω -). Důvodem je zásadní změna HOMO, kdy vicinální aminoskupiny díky vzájemné interakci jsou méně nukleofilní (rozdíl pKa obou aminoskupin je větší). 2) Reakce OPA s 1,2-diaminobenzenem poskytuje indano[1,2-a]benzimidazol (a) a nikoli v literatuře diskutovanou bis-Schiffovu bázi (b).



Nahoře: Rozdíl mezi HOMO 1,2- a 1,3-alifatických diaminů: V případě 1,2-diaminů je elektronová hustota rozložená po celé molekule, což snižuje nukleofilitu aminoskupin a mění jejich reakční mechanismus vůči OPA. Dole: Analýzou elektrochemických křivek a identifikací produktu reakce OPA s 1,2-diaminobenzenem byl prokázán vznik sloučeniny a) a nikoli b).

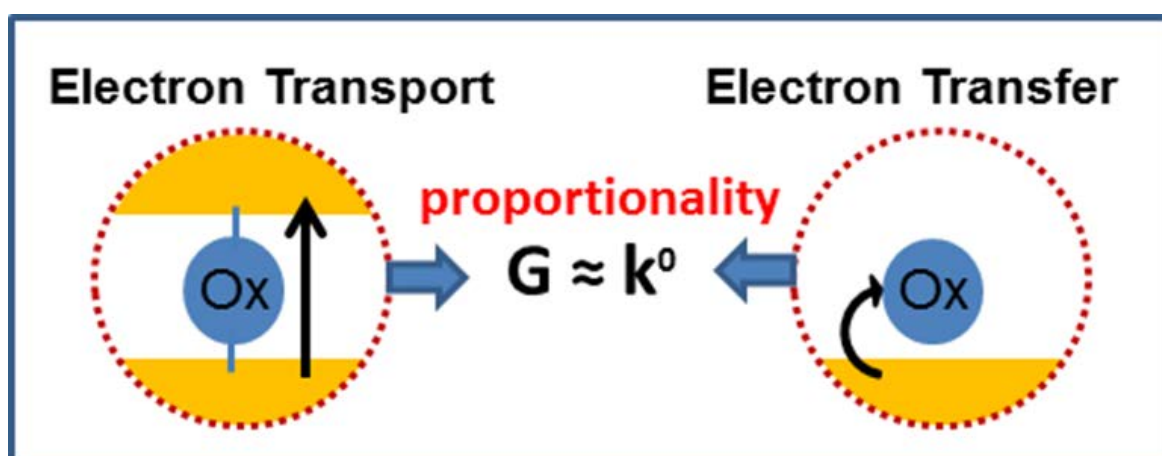
Joël Donkeng Dazie, Alan Liška, Jiří Urban, Jiří Ludvík, Reactivity of orthophthalaldehyde with aliphatic, alicyclic and aromatic primary diamines: Electrochemical study and mechanistic considerations, **J. Electroanal. Chem.**, 2018, 821, 131-139.
(<https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2018.02.019>)

Oddělení elektrochemie v nanoměřítu

Experimentální potvrzení korelace mezi elektrochemickým přenosem a transportem náboje v molekulách významných pro molekulární elektroniku.

Korelace mezi přenosem a transportem náboje v molekulách významných pro molekulární elektroniku byla zjištěna na modelovém systému molekulových drátů na bázi expandovaných molekul pyridinia pomocí elektrochemických metod a metod přerušování spojení kov-molekula-kov. Tento výsledek představuje první experimentální potvrzení teoreticky předpovězené závislosti, který posouvá rovinu poznání transportních jevů v nanosystémech na úrovni jednotlivých molekul o významný krok vpřed.

Spolupracující subjekt: Karlsruhe Institute of Technology, Germany



Existuje závislost mezi přenosem a transportem elektronu? Schematické znázornění závislosti mezi přenosem a transportem náboje v elektroaktivní molekule.

Š. Nováková Lachmanová, J. Šebera, V. Kolivoška, J. Gasior, G. Mészáros, G. Dupeyre, P. P. Lainé, M. Hromadová, Correlation of Electrochemical Properties of Expanded Pyridinium Compounds with their Single Molecule Conductance. *Electrochim. Acta*, 2018, 264, 301–311.

Oddělení elektrochemických materiálů

Elektrodové materiály pro barvivem sensibilizované a perovskitové solární články

Povrchová modifikace TiO_2 fotoanod a fotokatod z B-dopovaného diamantu pomocí donor-akceptorových organických chromoforů poskytla nové vysoce účinné elektrody pro aplikace v barvivem senzitivizovaných solárních článcích. Tenké vrstvy TiO_2 (anatasy, rutil) byly připraveny dvěma novými metodami, spray-pyrolýzou a termickou oxidací Ti filmů. Byly charakterizovány jako elektronově selektivní mezifáze pro aplikace v perovskitové a barvivem senzitivizované fotovoltice.

Spolupracující subjekt: EPF-Lausanne, Uni-Hasselt, VŠCHT, FZÚ, ÚOCHB

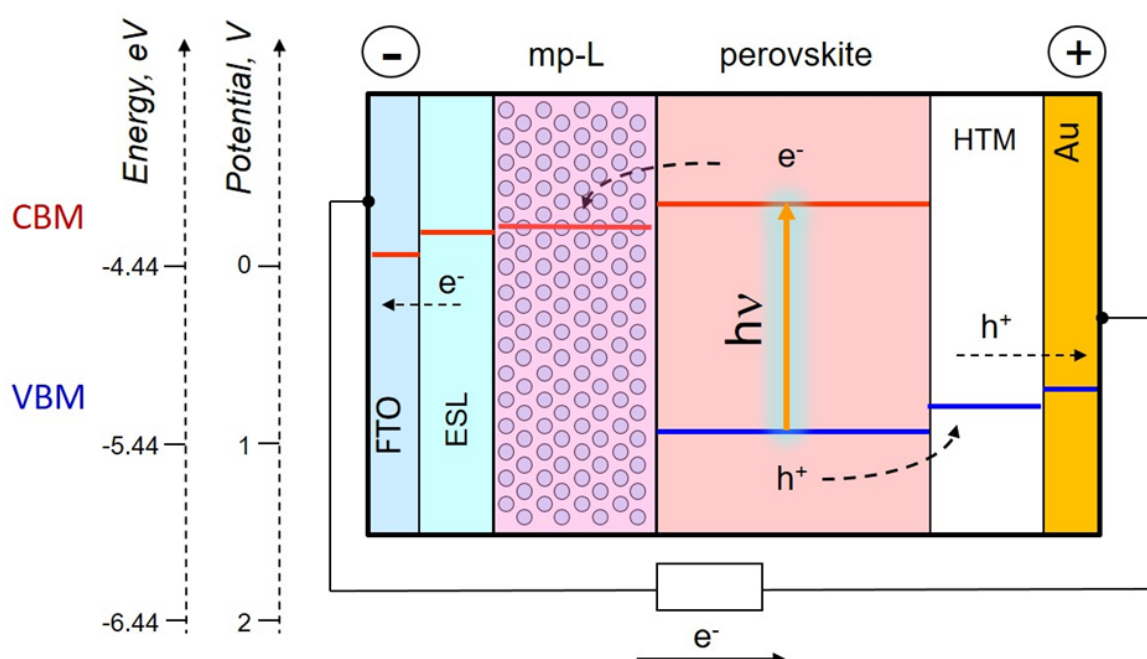


Schéma funkce elektronově selektivních mezifází v perovskitové fotovoltice. Schema klasické architektury perovskitového solárního článku (typu n-i-p). ESL = elektronově selektivní TiO_2 , mp-L = mesoporous layer infiltrated by perovskite, HTM = hole-transporting medium (e.g. CuSCN). vrstva (např. TiO_2) mp-L = mezoporézní vrstva infiltrovaná perovskitem, HTM = medium pro transport děr (např. CuSCN).

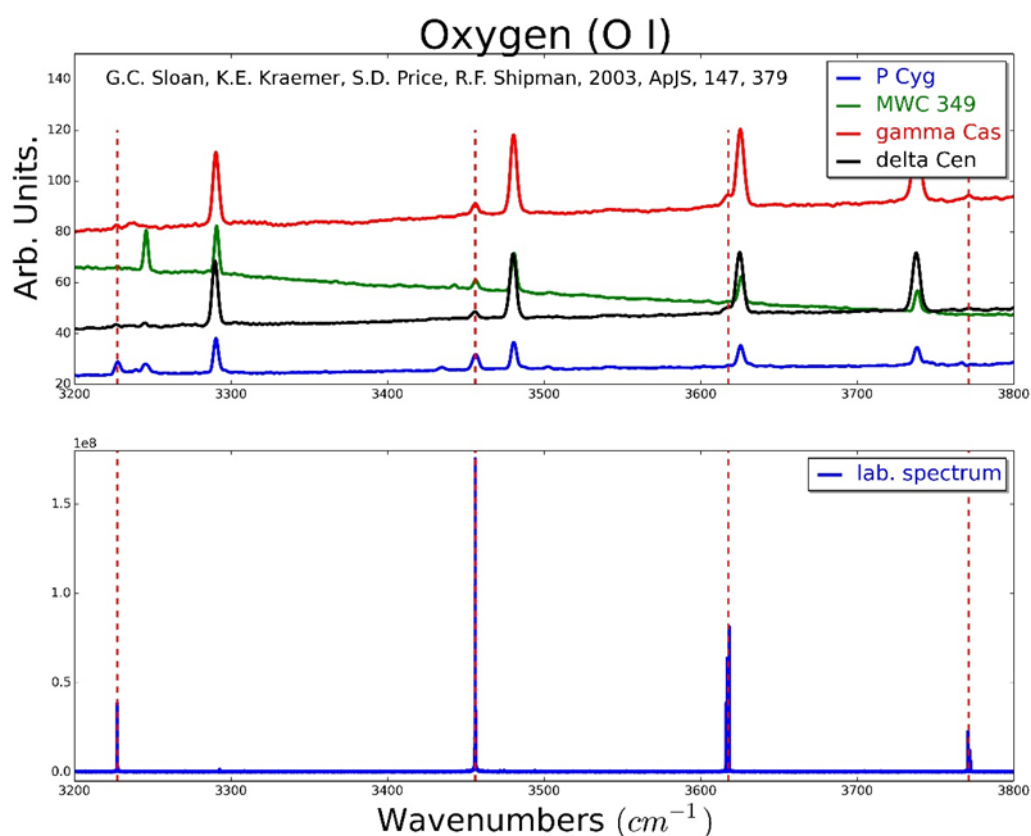
J. Barton, H. Krysova, P. Janda, H. Tarábková, P. Ashcheulov, V. Mortet, A. Taylor, J. Vávra, P. Cígler, L. Kavan, Chemical modification of diamond surface by a donor-acceptor organic chromophore (P1): Optimization of surface chemistry and electronic properties of diamond, *Appl.Mater.Today*, **2018**, 12, 153-162.

L. Kavan: "Electrochemistry and Perovskite Photovoltaics", *Curr.Opinion Electrochem*, **2018**, 11, 122-129.

Oddělení spektroskopie

FTIR laboratorní měření spekter kyslíku v oblasti 0.77–12.5 μm : Rydbergovy stavy a síly oscilátoru

Publikovali jsme přesné laboratorní měření infračervených emisních linií pro jeden z nejdůležitějších prvků v astronomii: kyslík. Přestože spektrální charakteristiky základních prvků představují jednu ze základních fyzikálních vlastností, tyto údaje v infračerveném oboru stále chybí. Pomocí unikátní metody kontinuální časově rozlišené FT spektroskopie jsme zaznamenali 135 linií kyslíku, které jsme pomocí kvantové teorie QDT přiřadili a vypočetli síly oscilátoru daných linií.



IČ spektrum atomárního kyslíku. Srovnání spekter vybraných hvězd (Infrared Space Observatory (ISO), horní graf) s vysoce rozlišeným laboratorním spektrem (dolní graf).

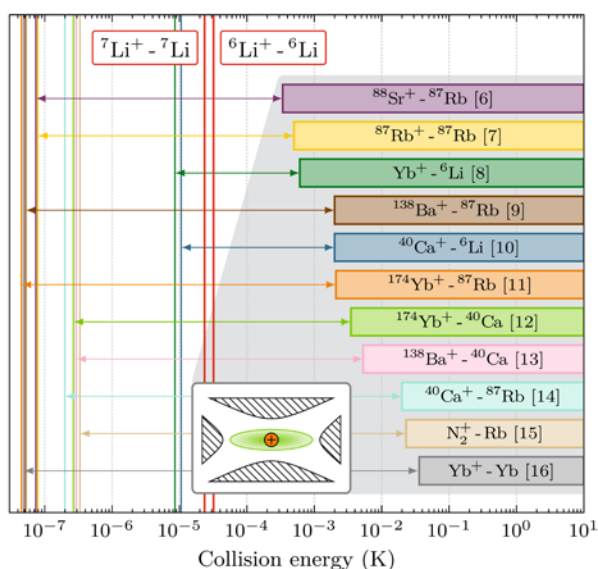
Civiš, S.; Kubelík, P.; Ferus, M.; Zanozina EM.; Pastorek, A.; Naskidashvili, AV.; Chernov, VE.;

FTIR Laboratory Measurement of O I Spectra in the 0.77-12.5 μm Spectral Range: Rydberg States and Oscillator Strengths. **Astrophysical Journal Supplement Series**, 2018, 239 (1) Article Number: 11.

Oddělení teoretické chemie

Dalekodosahové Rydbergovy molekuly a jejich využití ve studiu srážek atomů s kladnými ionty

Dalekodosahová Rydbergova molekula je pár dvou vzdálených atomů, jeden z nich je v základním a druhý v excitovaném stavu. Tyto molekuly umožňují výzkum srážek kationtů s neutrálními atomy v limitě nízkých energií, který se doposud nepovedlo experimentálně dosáhnout. Výpočetní modely těchto molekul vyvinuté na našem oddělení umožnily experimentální skupině Prof. Pfaua ve Stuttgartu navrhnout experiment zaměřený na ultrachladné atom-iontové srážky.



Atom-iontové srážky při nízkých energiích byly v posledních letech experimentálně studované u několika kombinací prvků. V experimentech s nejnižšími dosaženými kolizními energiemi (milikelviny) byly použity hybridní a Paulovy pasti. Ty však neumožnily dosažení ultrachladného kvantového režimu srážek. Rozdíl mezi dosaženou energií (pruhy vpravo) a limitem kvantového režimu (svislé čáry vlevo) ilustruje obrázek. Navržená experimentální metoda umožňuje vytvoření ultrachladného atom-iontového páru ionizací Rydbergovy molekuly lithia.

T. Schmid, C. Veit, N. Zuber, R. Löw, T. Pfau, M. Tarana, and M. Tomza. Rydberg Molecules for Ion-Atom Scattering in the Ultracold Regime, *Phys. Rev. Lett.*, 2018, 120, 153401.

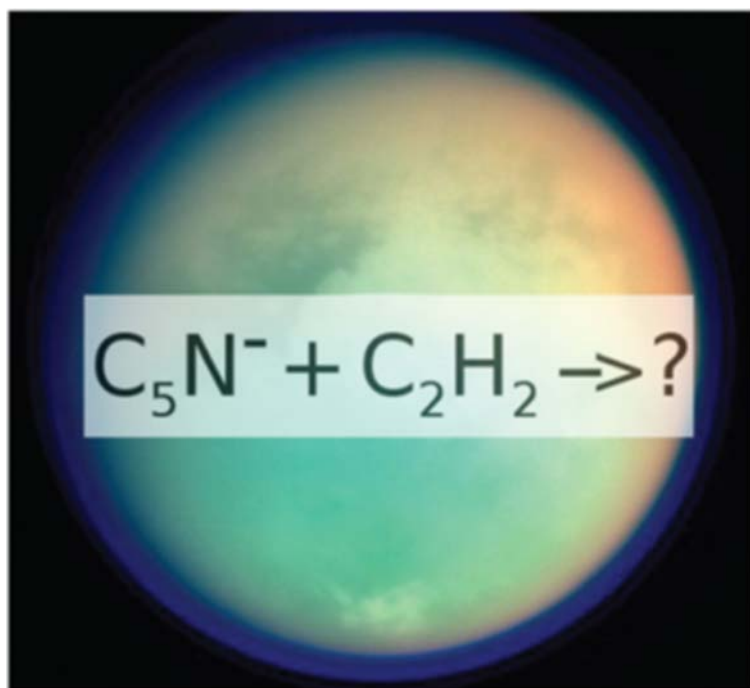
Michal Tarana and Roman Čurík, R-matrix calculations of electron collisions with a lithium atom at low energies, *Phys. Rev.*, 2019, 99, 012708.

Oddělení chemie iontů v plynné fázi

Reakce C_5N^- s acetylénem jako možný přechodový stupeň při vzniku vysokomolekulárních aniontů v ionosféře Titanu

Experimentální a teoretická studie reakce $\text{C}_5\text{N}^- + \text{C}_2\text{H}_2$ pomocí tandemového kvadrupólového spektrometru vedla k identifikaci různých reakčních kanálů a stanovení jejich prahových energií. Výsledky těchto experimentů byly porovnány s ab initio výpočty, pomocí kterých byly určeny možné reakční dráhy vedoucí k pozorovaným produktům a jejich termodynamické vlastnosti.

Spolupracující subjekt: Stockholm University, prof. W. Geppert



Reakce aniontů v atmosféře Titanu. Naše experimentální a teoretická studie popsala možné reakční mechanismy produkující anionty pozorované kosmickou sondou Cassini v atmosféře Titanu.

Carl Fredrik Linden, Jan Zabka, Miroslav Polasek, Illia Zymak and Wolf D. Geppert, The reaction of C_5N^- with acetylene as a possible intermediate step to produce large anions in Titan's ionosphere, [Phys.Chem.Chem.Phys.](#), 2018, 20, 5377.

Nejvýznamnější publikace:

Výsledky vědy a výzkumu dosažené pracovníky ústavu v roce 2018 byly publikovány ve **171 člancích v mezinárodních impaktovaných časopisech**, a ve **3 kapitolách** v cizojazyčné monografii. Tyto práce byly k datu vydání této zprávy již více než 450 krát citovány. Každý měsíc jsou v rubrice News-Important Publications anglických webových stránek ústavu zveřejňovány vybrané publikace. (<http://www.jh-inst.cas.cz/www/detail.php?dokument=132>).

Prosinec 2018

Chemical Reviews, 2018, 118, (23), 11259-11297.

M. Cebeauer, M. Amaro, P. Jurkiewicz, M.J. Sarmiento, R. Sachl, L. Cwiklik, M. Hof
Membrane Lipid Nanodomains

Astrophysical Journal Supplement Series, 2018, 239 (1), Article Number: 11.

S. Civis, P. Kubelik, M. Ferus, E.M. Zanozina, A. Pastorek, A.V. Naskidashvili, and V.E. Chernov

FTIR Laboratory Measurement of O I Spectra in the 0.77-12.5 μ m Spectral Range:
Rydberg States and Oscillator Strengths

Listopad 2018

Angewandte Chemie, 2018, 57, 1-6.

Experimentally Calibrated Analysis of the Electronic Structure of CuO

Martin Srnec, Rafael Navrtil, Erik Andris, Juraj Jašík, and Jana Roithová

iScience, 2018, 10, 87-97

Martin Srnec, Rafael Navrtil, Erik Andris, Juraj Jašík, and Jana Roithová

Experimentally Calibrated Analysis of the Electronic Structure of CuO. Angewandte Chemie, 2018, 57, 1-6.

Říjen 2018

Nanoscale, 2018, 10, 19064-19073.

Distinct roles of SNARE-mimicking lipopeptides during initial steps of membrane fusion

Alena Koukalová, Šárka Pokorná, Aimee L. Boyle, Nestor Lopez Mora, Alexander Kros, Martin Hof and Radek Šachl

Physical Review Letters, 2018, 121, 143402.

Resonances and Dissociative Electron Attachment in HNCO

M. Zawadzki, M. Cizek, K. Houfek, R. Curik, M. Ferus, S. Civis, J. Kocisek, J. Fedor

Září 2018

PNAS, 2018, 115 (44), E10287-E10294.

Beyond the classical thermodynamic contributions to hydrogen atom abstraction reactivity

Daniel Bím, Mauricio Maldonado-Domínguez, Lubomír Rulíšek, and Martin Srnec

Mass Spectrometry Reviews, 2018, 37, 630-651.

Mass spectrometry of aerosol particle analogues in molecular beam experiments

Michal Fárník, Jozef Lengyel

Srpen 2018

Obesity Surgery, 2018, 28, 8, 2439-2446.

Variation in Exhaled Acetone and Other Ketones in Patients Undergoing Bariatric Surgery: a Prospective Cross-sectional Study

Piers R. Boshier, Matyas Fehervari, Sheraz R. Markar, Sanjay Purkayastha, Patrik Spanel, David Smith, George B. Hanna

Applied Organometallic Chemistry, 2018, 32, 8, e4442.

B(C₆F₅)(3) catalysis accelerates the hydrosilane chlorination by Ph₃CCl

Adam Simarek, Martin Lamac, Michal Horacek, Jiri Pinkas

Červenec 2018

Journal of Hazardous Materials, 2018, 353, 5, 70-79.

Mechanism and kinetics of photochemical transformation of ketoprofen and its degradation intermediates

Lenka Hykrdova, Oliver Bajt, Jaromir Jirkovsky

Energy Environ. Sci., 2018, 11, 1779.

Comprehensive control of voltage loss enables 11.7% efficient solid-state dye-sensitized solar cells

W.W. Zhang; Y.Z. Wu, ; H.W. Bahng; Y.M. Cao; C.Y. Yi; Y. Saygili; J.S. Luo; Y.H. Liu; L. Kavan; J.E. Moser ; A. Hagfeldt, H. Tian; S.M. Zakeeruddin; W.H. Zhu; M Gratzel

Červen 2018

ACS Nano, 2018, 12 (7), pp 7141–7147.

Proton-Gradient-Driven Oriented Motion of Nanodiamonds Grafted to Graphene by Dynamic Covalent Bonds

Petr Kovaříček, Marek Cebecauer, Jitka Neburková, Jan Bartoň, Michaela Fridrichová, Karolina A. Drogowska, Petr Cigler, Jean-Marie Lehn, and Martin Kalbac

Langmuir, 2018, 34, 6405-6412.

Adsorption of Expanded Pyridinium Molecules at the Electrified Interface and Its Effect on the Electron-Transfer Process

Štěpánka Nováková Lachmanová, Grégory Dupeyre, Philippe P. Lainé, and Magdaléna Hromadová

Květen 2018

Applied Catalysis B-Environmental, 2018, 227, 70-78.

Photocatalytic performance of porous TiO₂ layers prepared by quantitative electrophoretic deposition from organic solvents

Radek Zouzelka; Monika Remzova; Libor Brabec; Jiri Rathousky

J. Chem. Theory Comput., 2018, 14, 2439-2445.

Intricate Case of Tetramethyleneethane: A Full Configuration Interaction Quantum Monte Carlo Benchmark and Multireference Coupled Cluster Studies

Libor Veis, Andrej Antalík, Örs Legeza, Ali Alavi, and Jiří Pittner

Duben 2018

Catalysis Reviews, 2018, 60 (1), 1-61.

Catalytic performance of advanced titanosilicate selective oxidation catalysts - a review

Jan Přech

J. Phys. Chem. Lett., 2018, 9 (5), 1118-1123.

Bobbing of Oxysterols: Molecular Mechanism for Translocation of Tail-Oxidized Sterols through Biological Membranes

Waldemar Kulig, Heikki Mikkolainen, Agnieszka Olżyńska, Piotr Jurkiewicz, Lukasz Cwiklik, Martin Hof, Ilpo Vattulainen, Pavel Jungwirth, and Tomasz Rog

Březen 2018

Phys. Chem. Chem. Phys., 2018, 20, 5900-5908.

Electrochemically controlled winding and unwinding of substrate-supported carbon nanoscrolls

H. Tarábková, Z. Zelinger and P. Janda

Current Opinion in Electrochemistry, 2018, 8, 45-51.

Stereoelectrochemistry of calixarenes -Molecules with multiple redox centers

Alan Liška and Jiří Ludvík

Únor 2018

Langmuir, 2018, 34 (7), 2565-2572.

(Picture on Journal Front Cover).

Atomistic Model for Nearly Quantitative Simulations of Langmuir Monolayers

Matti Javanainen, Antti Lamberg, Lukasz Cwiklik, Ilpo Vattulainen, and O. H. Samuli Ollila

ACS Catalysis, 2018, 8, 1779-1789.

Catalytic Properties of 3D Graphene-Like Microporous Carbons Synthesized in a Zeolite Template

Petr Sazama, Jana Pastvova, Cristina Rizescu, Alina Tirsoaga, Vasile I.

Parvulescu, Hermenegildo Garcia, Libor Kobera, Jürgen Seidel, Jiri Rathousky, Petr Klein, Ivan Jirka, Jaroslava Moravkova, and Vaclav Blechta

Leden 2018

ACS Nano, 2018 12 (1), 813-819.

Biomembrane Permeabilization: Statistics of Individual Leakage Events Harmonize the Interpretation of Vesicle Leakage

Stefan Braun, Šárka Pokorna, Radek Šachl, Martin Hof, Heiko Heerklotz, and Maria Hoernke

Electrochemistry Communications, 2018, 86, 113-116.

Open circuit potential transients associated with single emulsion droplet collisions at an interface between two immiscible electrolyte solutions

Antonín Trojánek, Vladimír Mareček, Zdeněk Samec

III.2 Výzkumné projekty

V roce 2018 ústav řešil 6 výzkumných projektů s podporou zahraničních poskytovatelů a 79 výzkumných projektů finančně podpořených několika různými tuzemskými poskytovateli, v nichž vědci ústavu vystupovali v roli řešitelů/spoluřešitelů či partnerů.:

VÝZKUMNÉ PROJEKTY FINANČNĚ PODPOŘENÉ NĚKOLIKA RŮZNÝMI TUZEMSKÝMI POSKYTOVATELI

POSKYTOVATEL	POČET PROJEKTŮ
GA ČR	54
MŠMT	16
TAČR	4
AV ČR	3
MPO	2

Významné projekty a strategie ústavu

From Graphene Hybrid Nanostructures to Green Electronics, řešitel: M. Kalbáč; projekt programu **ERC-CZ**. Poskytovatel MŠMT.

Nanomateriály a nanotechnologie pro ochranu životního prostředí a udržitelnou budoucnost (akronym vědecké infrastruktury - NanoEnviCz), řešitel: Martin Kalbáč, další účastníci projektu: Technická univerzita v Liberci / Ústav pro nanomateriály, pokročilé technologie a inovace; Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem / Přírodovědecká fakulta; Univerzita Palackého v Olomouci / Přírodovědecká fakulta; Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i.; Ústav experimentální medicíny AV ČR, v. v. i.; projekt programu Projekty velkých infrastruktur pro VaVaI (2010 - 2019).

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

Cílem programu ERA Chairs je umožnit evropským institucím získat prvotřídní akademiky, kteří dokáží pozvednout konkrétní výzkumné oblasti na nejvyšší světovou úroveň. Pozice ERA Chair přispěje k lepší integraci institutu Akademie věd J. Heyrovského do evropského výzkumného prostoru. Na ústav tak přichází významná vědecká posila, která povede zcela nové oddělení. Dr. habil. Štefan Vajda bude mít na starosti Oddělení nanokatalýzy, díky kterému se ústav bude moci hlouběji zaměřit na výzkum nanotechnologií a nanomateriálů s možným využitím v průmyslu i pro ochranu životního prostředí.

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

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

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i. (ÚFCH JH) se přihlásil k principům C&C dne 15. listopadu 2017 s cílem získat ocenění „HR Excellence in Research“. Dále získal projekt Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR s názvem Rozvoj kapacit ÚFCH JH, v. v. i. pro výzkum a vývoj s reg. č. CZ.02.2.69/0.0/0.0/16_028/0006251 (2018-2022), který napomáhá k implementaci těchto zásad. V roce 2018 byl zahájen dlouhodobý proces tzv. GAP analýzy, odhalující mezery ve 40 principech C&C. Na základě diskusí s vědci všech úrovní, administrativními a technickými pracovníky byla provedena GAP Analýza a připraven Akční plán pro nadcházející čtyři roky. Implementace strategie HRS4R je jedním ze způsobů, jak prokázat, že ÚFCH JH podporuje své vědce. Celý proces je kontrolován řídicím výborem jmenovaným interní směrnici č. 7/2017 (4. prosince 2017). Zástupci vědců, administrativního a technického personálu zřídili pracovní skupinu, jejíž členové se účastní procesů GAP analýzy a koncepce akčního plánu.

III.3. Ocenění

Následující vědečtí pracovníci a studenti byli v roce 2018 oceněni za výsledky své výzkumné činnosti:

prof. RNDr. Zdeněk Samec, DrSc. - Čestná oborová medaile Jaroslava Heyrovského za zásluhy v chemických vědách, udělila Předsedkyně Akademie věd ČR Prof. Eva Zažímalová

Mgr. Jaroslav Kočišek, Ph.D. - Prémii Otto Wichterleho vybraným, mimořádně kvalitním a perspektivním vědeckým pracovníkům AV ČR, kteří přispívají vynikajícími výsledky k rozvoji vědeckého poznání, udělila předsedkyně AV ČR Prof. Eva Zažímalová.

prof. Ing. Jiří Čejka, DrSc. - Cena Wernera von Siemens, Cena byla udělena za nejvýznamnější výsledek základního výzkumu, kde se konkrétně jednalo o objev nové metody syntézy zeolitů a její využití v katalýze, udělila Společnost Siemens, předal generální ředitel Siemens ČR Eduard Palíšek

prof. RNDr. Svatopluk Civiš, CSc., DSc. - Doktor věd v chemických vědách, Badatelská činnost v oboru chemických věd, analytická chemie, udělila předsedkyně AV ČR Prof. Eva Zažímalová.

HODNOCENÍ HLAVNÍ ČINNOSTI

Mgr. Alan Liška, Ph.D. - Metrohm Oral Presentation Award, Udělení ceny za nejlepší prezentaci během "Young Scientists Session" na XVII konferenci Metrohm, udělila Společnost Metrohm, RNDr. Libuše Trnková, CSc., Ing. Peter Barath, Ph.D.

Mgr. Mariia Lemishka, Best student presentation (SSC2018), Ocenění za prezentaci "Alfa oxygen for selective oxidation of hydrocarbons over binuclear transition metal ion structures in zeolites.FTIR spectroscopy, udělil: Organizing comitee of 13th conference on solid state chemistry

Mgr. Štěpánka Nováková Lachmanová - Nejlepší studentská přednáška na ISE konferenci v Itálii (ISE2018), Oceněna za nejlepší studentskou přednášku - "Expanded Pyridinium Molecules: Correlation of Their Electrochemical Behaviour and Single Molecule Conductance", udělil: International society of electrochemistry

Mgr. Antonín Knížek - Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie 2018, 1. místo v kategorii diplomová práce, udělila: Spektroskopická společnost Jana Marka Marci

Kamila Starkbaumová - Cena Učené společnosti pro středoškolské studenty, 1. místo za vědeckou práci na téma Záchyt těkavých organických látek a jejich kyslíkatých derivátů na nanočástice aerosolu v polárních stratosférických mracích, udělila: Učená společnost ČR

Hugo Kocek - 3. místo v celostátním kole SOČ, v oboru biologie. Stážista Hugo Kocek z Gymnázia Nad Štolou Praha 7 se svou prací z oboru biologie na téma "Příprava a charakterizace mutantů glykoproteinu CD4 pro funkční a zobrazovací analýzu na T-buňkách" obsadil v celostátním kole soutěže SOČ 3. místo (školitel: Dr. M. Cebecauer z Odd. biofyzikální chemie), udělil: ústřední komise SOČ (soutěž pořádá MŠMT)

Kristýna Pokorná - 8. místo v celostátním kole SOČ, v oboru chemie. Stážistka Kristýna Pokorná z Gymnázia Roudnice nad Labem se svou prací na téma "Příprava guanidínátových komplexů zirkonia" obsadila v celostátním kole 8. pozici (školitel Dr. Michal Horáček z Odd. molekulární elektrochemie a katalýzy, udělila: Ústřední komise SOČ (soutěž pořádá MŠMT)

Archiv všech ocenění lze nalézt na stránce ústavu pod odkazem:

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

III.4. Propagace a popularizace

Celoročně probíhá spolupráce ústavu s médii (televize, rozhlas, tištěná média a internetové servery) při popularizaci výsledků činnosti vědců. **V roce 2018 své výsledky ústav prezentoval veřejnosti prostřednictvím tiskových zpráv generovaných ve spolupráci s agenturou PR Konektor.**

Výzkumná činnost vědců ústavu byla v průběhu roku 2018 pravidelně představována veřejnosti prostřednictvím popularizačních článků v denním tisku či časopisech, rozhovorech v rozhlasu a televizi. Vznikly desítky výstupů do médií, z nichž ty nejvýznamnější byly zpracovány a zveřejněny na webových stránkách ústavu (aktuálně v odkazu MEDIA sloužícím k dlouhodobé popularizaci výsledků práce vědců ústavu a v procesu vzdělávání zájemců o přírodní vědy (především v programech pro střední a základní školy; <http://web.jh-inst.cas.cz/media>).

Ukázka některých výstupů v médiích:

Český rozhlas Plus - magazín Leonardo, 20. 06. 2018. Rozhovor s Martinem Hofem v návaznosti na udělení prestižního grantu Evropského výzkumného prostoru ERA Chairs, který Ústav J. Heyrovského Akademie věd ČR nedávno získal. Ten pomáhá pozvednout vědecké instituce mezi ty nejlepší na světě. Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského je teprve druhým vědeckým centrem u nás, kterému se podařilo na toto prestižní financování dosáhnout. Martin Hof ve svém rozhovoru porovnává financování české vědy se zahraničím.

Česká televize, magazín Věda 24 (premiéra 21. 1. 2018 od 18.30 hodin). Česká televize. V reportáži nazvané Syndrom suchého oka hovoří o výzkumu svého týmu a jeho výsledcích Lukáš Cwiklik z Odd. teoretické chemie.

ČRo Radiožurnál - pořad Experiment (premiéra 17. 3. 2018) ČRo Radiožurnál. Rozhovor o výzkumu týmu laserové spektroskopie, mj. také se věnujícím počátkům života na zemi, poskytl Martin Ferus, vedoucí Oddělení spektroskopie.

ČRo Plus, pořad Hovory (19. 1. 2018 premiéra ve 22:05). Hostem pořadu byla Květoslava Stejskalová. Působí v Ústavu fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského, kde se dlouhodobě věnuje propagaci vědců, popularizuje vědu a vzdělávacími programy oslovuje mladé zájemce o přírodní vědy. Svého hosta do pořadu pozval Vlastimil Ježek (jeden z bývalých ředitelů ČRo).

Vesmír 97, 140, 2018/3. časopis Vesmír. Biliár s molekulami. Rozhovor s Michalem Fárníkem o výzkumu týmu laboratoře klastrů a jejich projektech.

Časopis Týden - Čeští vědci se přiblížili materiálu, který by mohl nahradit svaly, 04. 04. 2018. Vědcům z Ústavu fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského Akademie věd v Praze se podařilo experimentálně dokázat rozvinování a svinování uhlíkové nanorole. Tím se přiblížili materiálu, který může v budoucnu nahradit práci svalů v lidském těle. O svém objevu hovoří Pavel Janda, Hana Tarábková a Zdeněk Zelinger.

Český rozhlas Plus- magazín Leonardo + Radio Wave, 4. 6. 2018. Grafen je nejtenčí známý materiál. Jde o jednu vrstvu uhlíku, která strukturou připomíná včelí plástev. Jaké jsou možnosti jeho využití? Stane se jedním z materiálů přelomovým? Hostem Magazínu Leonardo byl Martin Kalbáč, vedoucí Oddělení nízkodimenzionálních systémů.

Česká televize (Studio ČT 24) Kapalná voda na Marsu, 27. 7. 2018. Je známo, že voda existuje na Marsu ve formě ledu. V současné době vědci předpokládají existenci vody v kapalně fázi, která se vyskytuje pod povrchem. Dřívější existenci kapalné vody dokazují vyschlé toky řek a dna jezer. Více k tématu promluvil Martin Férus z Oddělení spektroskopie.

Česká televize, Studio 6: Co dali Češi světu: polarografie, 19. 10. 2018. Rozhovor s Květou Stejskalovou o Heyrovského objevu polarografie, jeho životě a Nobelově ceně. Rozhovor pořízen v rámci 100 let vzniku Československa. Zazněly i krátké rozhovory o polarografii s J. Ludvíkem a L. Pospíšilem (natočené v ÚFCH JH 27. března 2017 u příležitosti 50 let uplynulých od smrti J. Heyrovského)

Popularizace výsledků VaV prostřednictvím programů pro zájemce o přírodní vědy:

V roce 2018 uspořádal ústav 117 popularizačních a vzdělávacích akcí/programů pro studenty VŠ, žáky SŠ a ZŠ, předškoláky MŠ a zájemce z široké veřejnosti, které navštívilo celkem 9780 návštěvníků.

Podrobný harmonogram programů roku 2018 pod názvem *Žijeme chemií 2018* je archivován ve webové aplikaci popularizačního projektu Tři nástroje s adresou <http://www.jh-inst.cas.cz/3nastroje>.

Přehled nejvýznamnějších popularizačně-vzdělávacích programů a akcí roku:

O TVT 2018 vědci ÚFCH J. Heyrovského připravili pro veřejnost setkání s vědou a výzkumem v trvání celkových 53 hodin. Přednášelo se, chodilo do laboratoří, experimentovalo na workshopech, ale taky hrálo chemické divadlo pro ty nejmenší badatele. Vznikla pestrá ochutnávka vědy, kterou navštívilo celkem 640 zájemců ve věku od 3 do úctyhodných 85 let.

Pro žáky a pedagogy středních škol pokračoval program *Den (s) vědcem* zahrnující workshopy, praktická měření či popularizační přednášky a exkurse. Žáci ze základních či mateřských škol z celé ČR absolvovali workshopy *Chemie není nuda* (2. stupeň ZŠ) nebo chemická divadla představujících chemii a profesi vědce pod názvem *Posvit' si citronem na duhu* (1. stupeň ZŠ a předškoláci MŠ).

Zájemcům z veřejnosti byl také věnován program sobotních workshopů (1x měsíčně) pod názvem *Cesta za nobelovkou- díl IV a V*. 40 dětí ve věku 5-15 let mělo opět možnost seznámit se s chemií a fyzikou prostřednictvím experimentování v laboratoři.

29 středoškoláků z 15 škol z celé ČR navštívilo tradiční srpnovou školu (20. - 24. 8. 2018) NANOškola 2018, která byla již potřetí podpořena projektem MŠMT v programu Podpory nadaných žáků SŠ a ZŠ (projekt 0010/7/NAD/2018).

Celoroční stáže v projektu *Otevřená věda AV ČR 2018* v ústavu absolvovalo 15 středoškoláků. Dalších 33 středoškoláků docházely do ústavu na své mimoškolní stáže (v projektu *Tři nástroje*), či zde studenti vykonali odborné praxe (studenti několika pražských škol či SPŠCH z Ostravy).

Ústav se na dva roky zapojil do 2 projektů Šablony SŠ v programu OP VVV MŠMT řešených MSŠCH z Prahy 1 a BiGy ze Žďáru nad Sázavou a svými výukovými bloky obohatil a zpestřil výuku v chemii a fyzice.

V roce 2018 ústav uspořádal celkem 7 výstav: 3 x vlastní putovní výstavu Příběh kapky připomínající vědce Jaroslava Heyrovského (25. Výstava v Českém Krumlově, 26. ve Znojmě a 27. v Pardubicích). Virtuální podoba výstavy, která trvá od roku 2009, a za celou dobu jejího trvání ji navštívilo přes 29 000 návštěvníků, je aktualizována na její webové stránce s adresou <http://www.jh-inst.cas.cz/heyrovsky>). Dále tým výstavy spolupracoval na vytvoření výstavy Zlaté české ruce a století expozicí o Jaroslavu Heyrovském a polarografii (Regionální muzeum Vysoké Mýto). V ústavní komorní Galerii 4P proběhly 3 samostatné výstavy s různou tematikou: tradiční každoroční výstava "Nejen prací živ je vědec, výstava "Věda a umění/ Umění a věda II" a výstava "Lumír Čmerda: Pastely".

Ústav v roce 2018 vydal 10 tiskových zpráv:

Proteiny zahušťují buněčné membrány. I když jinak, než jsme si mysleli

Buněčné membrány vytvářejí prostředí pro mnohé životně důležité procesy. Proto se vědci již dlouho snaží zjistit, co ovlivňuje jejich vlastnosti. Nyní se zaměřili převážně na lipidy a blízké vnitrobuněčné struktury (cytoskelet). V membránách jsou však početně zastoupeny i proteiny, jejich vliv na tyto vlastnosti byl však dosud vnímán pouze okrajově. Vědci z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského, kteří se pod vedením Marka Cebecauera věnují výzkumu buněčných membrán lymfocytů, zjistili, že členitý povrch membránové části proteinů způsobuje zásadní změny v chování lipidů. Tento proces zásadně mění vlastnosti membrán a může ovlivňovat fungování buněk nebo úspěšnost klinické terapie využívající liposomy pro cílené vnášení léků do buněk. Výsledky výzkumu byly nyní publikovány v prestižním mezinárodním vědeckém magazínu iScience.

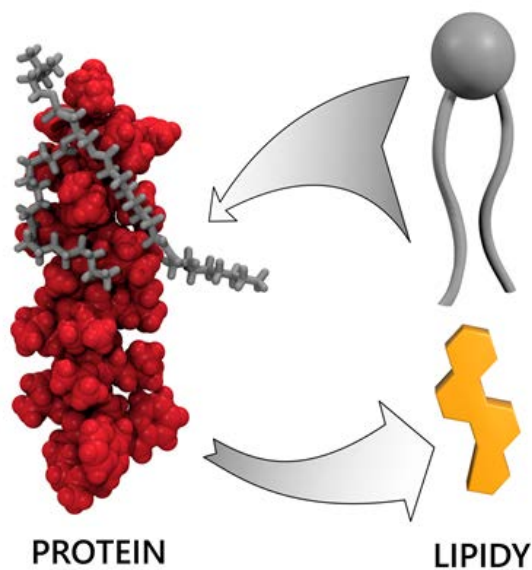
Praha, 12. prosince 2018

Membrány jako takové jsou tvořeny lipidy, které utvářejí dvojitou vrstvu bránící nekontrolovatelnému průniku různých látek do buněk. Kromě lipidů jsou membrány tvořeny i proteiny, které jsou hlavními aktéry fyziologických procesů, jako je látková výměna nebo komunikace buněk se svým okolím. Jejich vliv na membrány se všeobecně považuje za strukturní a přímé ovlivňování dynamiky membrán a spíše se připisuje jejich velikosti a množství, takzvanému „crowding“ efektu. Ten si můžeme představit jako vliv hustoty stromů na rychlost, kterou můžeme běžet v lese. Jenže proteiny se v membránách pohybují poměrně svižně - proto je tento efekt možné očekávat jen v ojedinělých případech.

Pro výzkum, zda mohou proteiny ovlivňovat vlastnosti membrán komplexněji, vědci vedení Markem Cebecauerem použili model syntetických lipidových vezikul s proteiny v kombinaci s počítačovými simulacemi. „Modelové systémy nám umožňují kontrolovat složení membrán a tím odlišovat jevy probíhající ve sledovaných membránách. V buňkách se tyto jevy překrývají a není možné je odlišit jeden od druhého. Počítačové simulace pak umožňují detailní náhled do struktur a jevů, které současnými technologiemi nemůžeme sledovat experimentálně. Díky kombinaci těchto dvou přístupů jsme zjistili, že proteiny způsobují tuhnutí membrán, a to z toho důvodu, že jejich povrch je drsný s výraznými prohlubeninami. V těch se zachytávají nožičky lipidů (Obr. 1), což způsobuje zpomalení všech membránových procesů v oblastech se zvýšeným výskytem proteinů. Kdyby tento jev překročil jistou mez, mělo by to za následek zpomalení či zastavení kritických buněčných procesů, které se na membráně odehrávají,“ vysvětluje smysl a výsledky výzkumu Cebecauer. Mezi procesy, které probíhají prvotně na buněčné membráně, patří třeba rozpoznávání cizích těles (např. virů) imunitními buňkami nebo přenos vzruchů neurony, které způsobují správné fungování mozku.

Kromě lipidů a proteinů je nedílnou součástí svrchních membrán ještě cholesterol. Dělá je totiž odolnější vůči různým stresovým situacím, kvůli kterým by do buněk nekontrolovatelně pronikala voda, soli nebo jiné látky. Studium membrán s cholesterolem a proteiny vědci z ÚFCHJH zjistili, že cholesterol se k proteinům v membránách vůbec nepřibližuje. To má pravděpodobně za následek tvorbu oblastí se zvýšeným výskytem buď té či oné látky. Ve výsledku můžeme dostat oblasti s velmi různými chemickými a fyzikálními vlastnostmi. „Pochopení základních jevů ovlivňujících vlastnosti buněčných membrán je důležité například pro pochopení některých fyziologických a patologických procesů probíhajících na membránách v buňce nebo kvůli lepšímu navrhování partikulí pro vnášení léků do cílových buněk – třeba do těch nádorových. Různé části membrány mohou mít různé vlastnosti, a proto je potřebné důkladně promyslet, kterou částí se bude léková partikule do buňky dostávat. Pohybujeme se však v nanometrech,“ upřesňuje Cebecauer.

Cebecauer a jeho tým ve výzkumu dále pokračují – teď se však zaměřují na problematiku opačnou, tedy působení lipidů na nekontrolované shlukování proteinů. Spolupracují na něm s vědci z britské Cambridge University pod vedením profesora Davida Rona. Cílem dalšího bádání je zjistit důvod shlukování proteinů v syntetických modelech a ideálně přijít s řešením, jak těmto reakcím zamezit.



Obr. 1 Členitý povrch proteinů (červeně) způsobuje zachytávání nožiček lipidů (šedě) a zpomalení jejich pohybu v membráně. Cholesterol se svou plochou strukturou (žlutě) se proteinům vyhýbá

Článek:

Olšinová Marie, Jurkiewicz Piotr, Kishko, Iryna; Sýkora, Jan; Sabó, Jan; Hof, Martin; Cwiklik, Lukasz and Cebecauer, Marek. Roughness of transmembrane helices reduces lipid membrane dynamics. *iScience* 10, 87-97 (20018). DOI: 10.1016/j.isci.2018.11.026

Elektronové srážky v českých laboratořích objasňují kvantovou exotiku a přispívají k boji proti klimatickým změnám

Nenápadný projekt, který demonstruje, jak může mít čistě základní výzkum nečekané aplikace v praxi. Mezinárodní tým vědců v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR zkoumá srážky molekul s volnými elektrony, při nichž dochází k různým kvantovým exotickým efektům. Díky unikátním laborořím je dokáží studovat nejspíš nejlépe na světě. Teď tuto infrastrukturu využívají také k výzkumu, který směřuje k nahrazení skleníkových plynů používaných ve vysokonapěťových izolacích. Ty nalezneme téměř ve všech elektrárnách na světě a v současnosti za ně neexistuje náhrada.

Praha, 13. listopadu 2018

Výzkum se zaměřuje na popis rezonancí, které vznikají při střetech molekul s elektrony ve vysokém vakuu, tedy při tlaku řádově miliardkrát nižším, než má naše atmosféra. K vytvoření těchto krátce žijících komplexů je zapotřebí nízká rychlost, pohybující se v jednotkách elektronvoltů – jen pro srovnání: elektrony ve dříve používaných televizních obrazovkách mají energii okolo dvaceti tisíc elektronvoltů, energie letícího komára je přibližně bilion elektronvoltů.

„Rád používám srovnání mírně přitažené za vlasy, že máme k chemii podobný přístup, jako mají lidi v CERNu přístup k částicové fyzice: srážíme navzájem věci, jenže my to děláme při mnohem nižších energiích,“ vysvětluje Juraj Fedor, který v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR působí v rámci Fellowship J. E. Purkyně.



Trochoidální elektronový spektrometr, který slouží k výzkumu nízkoenergetických elektronových srážek

Při těchto rychlostech se elektron na krátký čas přilepí k molekule, čímž vznikne komplex nazývaný rezonance. Na nich dokáží vědci velmi detailně sledovat ultrarychlou dynamiku pohybu atomů v molekulách i exotické kvantové efekty, při nichž se částice chovají jinak než v převážné většině běžných chemických reakcí. Mezinárodní tým vedený Jurajem Fedorem popsal nově objevený druh takového komplexu, rezonanci se smíšenou symetrií, a výsledky výzkumu publikoval ve spolupráci s Ústavem teoretické fyziky MFF UK v prestižním Physical Review Letters.

„Domníváme se, že právě tato rezonance hraje úlohu v tom, jak vede dopad elektronu k rozpadu velkého množství různých molekul,“ uvádí Fedor, který dříve působil na univerzitě ve švýcarském Friburgu, jež do Prahy zapůjčila část experimentální infrastruktury, se kterou tým pracuje.

K velkému množství srážek molekul s volnými elektrony dochází mimo jiné v takzvaných izolačních plynech. Ty dokáží přerušit elektrický výboj a používají se proto v elektrických izolacích a rozvaděčích vysokého napětí. Jako jejich náplň se po desetiletí používal fluorid sírový (SF₆), který je však velmi silným skleníkovým plynem. „Vzhledem k současné environmentální politice je velký administrativní

tlak na jeho zákaz. Jediný důvod, proč není zakázaný už nyní, je, že za něj neexistuje náhrada," doplňuje Fedor.

Právě na nalezení náhrady za tento plyn nyní pracuje jeho skupina v rámci projektu Technologické agentury ČR ve spolupráci s vývojovým střediskem firmy Eaton v Roztokách. Výsledkem této spolupráce by měl být funkční prototyp vysokonapěťového spínače. „Tyto spínače se používají prakticky v každé elektrárně na světě,“ popisuje Fedor důležitost projektu. I díky vědcům z Ústavu Jaroslava Heyrovského tak můžeme doufat, že emise skleníkových plynů se v této oblasti lidské činnosti podaří eliminovat.

V Heyrovského ústavu popsali dosud neznámý vliv na kinetiku štěpení vazeb mezi uhlíkem a vodíkem. Faktor asynchronicity pomůže například v organické katalýze

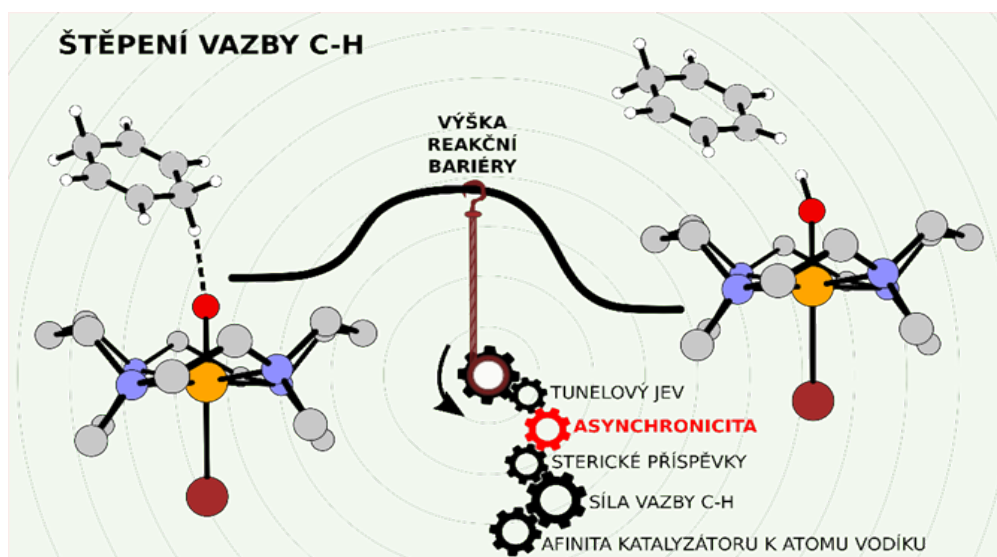
Významný americký vědecký časopis *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* (ve zkratce PNAS), který vydává americká Národní akademie věd, tento týden zveřejnil studii vědců z pražského Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského. Těm se podařilo vypracovat teoretický model, který postihuje energetiku reakcí, při nichž se štěpí vazba mezi atomy uhlíku a vodíku. Díky němu byli schopni například vysvětlit, jakým způsobem lze docílit štěpení silnějších vazeb na úkor těch slabších, přítomných v téže molekule. Publikovaný článek bude mít význam jak pro rozšíření znalosti o fyzikálně-chemických vlivech na kinetiku přenosu atomu vodíku, tak pro možnost racionálně vyvíjet katalyzátory s vyšší účinností a selektivitou, třeba ve farmaceutickém průmyslu.

Praha, 26. září 2018

Řada enzymů je schopna štěpit velmi silné chemické vazby utvořené mezi atomy uhlíku a vodíku (zkráceně vazby C–H), a tím v přírodě iniciovat spoustu chemických přeměn. Štěpení těchto vazeb je podstatné také v mnoha průmyslových aplikacích, zejména pak v organické katalýze nebo syntéze léčiv. Intuitivně přitom platí, že čím je štěpená vazba slabší, tím je proces snadnější, což odpovídá nižší energetické bariéře reakce.

Skupině pracovníků z Heyrovského ústavu, tvořenou Martinem Srncem, Danielem Bímem a Mauriciem Maldonado-Domínguezem, doplněnou navíc o Lubomíra Rulíška z Ústavu organické chemie a biochemie, se nyní podařilo popsat dosud neznámý příspěvek, který odporuje tomuto intuitivnímu chování. Faktor asynchronicity, jak svůj objev pojmenovali, mimo jiné vysvětluje, proč jsou některé enzymy schopny přednostně štěpit silnější vazby C–H, před vazbami slabšími.

„Teoretický model jsme zformulovali na základě kvantově chemických výpočtů, na nichž má zásluhu především Daniel Bím. Podle tohoto modelu lze neintuitivní chování přisoudit rozdílným termodynamickým hnacím silám pro přenos elektronu a protonu – částicím, z nichž se atom vodíku skládá.“ vysvětluje vedoucí výzkumu Martin Srnec. „Námi pozorované vlastnosti lze navíc velmi snadno počítat i měřit, což umožňuje snadné využití modelu experimentálními i teoretickými chemiky,“ dodává.



Článek publikovaný v prestižním americkém magazínu PNAS má význam jak pro rozšíření znalosti o fyzikálně-chemických vlivech na reakční bariéru přenosu atomu vodíku, tak pro možnost racionálně vyvíjet katalyzátory s vyšší účinností a selektivitou vůči různým vazbám substrátů.

Martin Srnec se studiu selektivní aktivace vazeb C–H začal věnovat už před několika lety, během jeho postdoktorální stáže na Stanfordově univerzitě v Kalifornii. Tam se mezi lety 2011 a 2013 věnoval spektroskopické analýze geometrických a elektronových vlastností metaloenzymů. Až po návratu do Prahy se se svým týmem pustil do vývoje metodologie pro přesný výpočet veličin popisujících schopnosti látek na sebe vázat atom vodíku, elektron nebo proton. Před rokem a půl pak začali výpočetně studovat vliv těchto vlastností na reakční bariéru spjatou s oxidací vazeb uhlíku a vodíku, což vedlo k výsledkům publikovaným právě v americkém časopise PNAS.

„Naše práce samozřejmě zdaleka není u konce. Cítíme, že jsme v rámci našeho kvantitativního modelu asynchronicity schopní dále obsáhnout více teoretických konceptů, které se během dlouhých let rozvíjely na různých místech po celém světě, některé třeba již od 70. let minulého století,“ upřesňuje Srnec, a vysvětluje: *„Sjednocením těchto konceptů chceme zjednodušit popis termodynamických vlivů na kinetiku spřaženého přenosu elektronu a protonu. Zároveň chceme tento model převést do stavu, který umožní spolehlivé a rychlé předpovědi ohledně reaktivity a selektivity vůči různým vazbám nejen mezi uhlíkem a vodíkem.“*

Podle Srnce by právě toto mohlo nalézt pozitivní odezvu v průmyslu – a to hlavně při vývoji nových syntetických přístupů či katalyzátorů, které by významně zefektivnily provedení reakcí s velkým společenským dopadem, jakou je například produkce metanolu z metanu.

„Mnoho chemických přeměn v nás a kolem nás stojí a padá s přenosem atomu vodíku, s trochou nadsázky se proto s konceptem asynchronicity v každodenním životě již běžně setkáváme, jen jsme o tom doposud nevěděli. Jde o všudypřítomný fyzikální jev,“ uzavírá Srnec.

NANO 2018: Letní škola zavede talentované středoškoláky do nanosvěta

Již po deváté otevírají vědci z ÚFCH J. Heyrovského před koncem prázdnin své laboratoře a učebny středoškolským zájemcům o chemii, fyziku a biologii, aby je v rámci týdenní letní školy zavedli do světa nanotechnologií a nanomateriálů. Letošní škola s akronymem NANO2018 přivítá mezi 20. a 24. srpnem třicítku talentovaných středoškoláků z 15 škol z celé České republiky. Domovem se jim stanou učebny a laboratoře Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR v Praze 8 a studentský život okusí na kolejkách MFF UK v Praze 7-Tróji.

Praha, 17. srpna 2018

Středoškoláci se stanou posluchači prázdninové školy na téma Nanomateriály a nanotechnologie. V rámci školy se prostřednictvím ukázek praktických měření v laboratořích, přednášek, workshopů a exkursí seznámí se zajímavými tématy řešenými v ústavu, do kterých by se sami, ještě jako středoškoláci, mohli zapojit v rámci odborných stáží v průběhu nadcházejícího školního roku. „Na letošní školu přijedou zájemci o fyziku, chemii či biologii, žádní nováčci, v soutěžích SOČ, olympiádách a jiných kláních z oboru přírodních věd mají již řadu vavříků. Součástí přihlášek byly také krátké motivační dopisy, ze kterých je patrné, že obory, jež letní škola představuje, ve studentech probouzí zvědavost, tolik potřebnou pro jejich další rozvoj,“ představuje letošní ročník Květa Stejskalová, která školy každoročně připravuje a organizuje.

„Cílem školy je představit některé obory fyzikální chemie a směřovat tak středoškoláky nadané na přírodní vědy ke studiu fyzikálních a chemických oborů na vysoké škole, některé potom i ke kariéře vědce. Z každé letní školy se nám jich po prázdninách několik objeví v našem ústavu na stážích,“ vysvětluje záměr, proč školu každoročně ústav pořádá právě pro středoškoláky, Michal Fárník, zástupce ředitele ústavu pro vzdělávání. Prostřednictvím série praktických měření v laboratořích s elektronovými či AFM mikroskopy, různými spektroskopickými a laserovými technikami, hmotnostním spektrometrem, nukleární magnetickou resonancí, elektronovou paramagnetickou resonancí, elektrochemickou technikou pro voltametrické stanovení určitých látek či vybavením pro přípravu a charakterizaci nanočástic s aplikací v ochraně památek se posluchači školy seznámí se zajímavými metodami, jejich přístrojovou technikou a odborníky, kteří v těchto oborech vědecky pracují a bádají.

Desítky přednášek nabídne pohled do nanosvěta jako takového (popis procesu na atomární/molekulární úrovni) či do problematiky cílené přípravy nanomateriálů pro různé technologické procesy včetně energetiky, elektroniky, ochrany životního prostředí a památek. Studenti se rovněž dozví důležité informace o složitém procesu tvorby vědeckých výsledků v rámci základního či aplikovaného výzkumu a také se seznámí s problematikou duševního vlastnictví, která se na úrovni středoškolského studia přednáší jen zřídka.

A co od nanoškoly očekávají sami její studenti? „Už na základní škole jsem se účastnil jazykových, fyzikálních a matematických soutěží, a to i krajských kol. V budoucnu bych rád studoval obor chemie. Věřím, že tento obor je velmi perspektivní a že se bude nadále rozvíjet. Od letní školy očekávám rozšíření svých dosavadních znalostí z chemie o nekonvenční poznatky z oboru nanotechnologie. Taký se těším na práci v kolektivu a na zajímavé pokusy v laboratorních podmínkách,“ představuje se v motivačním dopise absolvent 1. ročníku gymnázia GPOA ze Znojma. „Účast na letní škole mi doporučila moje učitelka chemie a přátelé z vyššího ročníku naší školy, kteří ji absolvovali vloni a byli nadšení. Beru ji jako příležitost, jak poznat a naučit se nové věci,“ prozrazuje své rozhodnutí absolvovat letní školu student z chemické průmyslovky z Ostravy.

„Náš tým vědců a popularizátorů PEXED dlouhodobě spolupracuje s více než stovkou škol středních, základních, ale i mateřských a naše programy jsou tak systematicky směřovány k žákům a pedagogům těchto škol. V našich programech založených na experimentování se je daří dlouhodobě přesvědčovat o tom, že chemie, fyzika a biologie nejsou nudné nezajímavé obory, ale naopak poskytují nekonečné poznání obohatené dobrodružstvím,“ dodává Květa Stejskalová.

Více se o škole a jejím programu (včetně fotogalerie z jejího průběhu) dozvíte z webové aplikace s adresou <http://www.jh-inst.cas.cz/3nastroje/detail.php?p=49>.

Léto s nanomateriály: Prémiová letní nanoškola pro vysokoškoláky odstartuje na konci srpna

Od pondělí 27. 8. do středy 29. 8. 2018 se pod záštitou velké výzkumné infrastruktury NanoEnvicZ koná první ročník letní nanoškoly s názvem „Nanomateriály a životní prostředí“. Její program je určen pro studenty vysokých škol, kteří se zajímají o nové poznatky ze světa nanomateriálů a nanotechnologií. Účastníky čekají tři nabitě dny zaměřené na aplikaci nanomateriálů a nanotechnologií související s ochranou životního prostředí a lidského zdraví. Mottem školy je „Ve třech dnech ze tří různých pohledů“.

Praha, 17. srpna 2018

Program školy začíná 27. 8. 2018 v Ústavu experimentální medicíny AV ČR, v. v. i. Studenti se mohou těšit na témata nanotoxikologie a nanobezpečnost. Rozvoj těchto vědních oborů úzce souvisí s vývojem nových nanomateriálů a nanotechnologií, kdy je třeba sledovat, jak vlastní používání nanočástic může ovlivnit naše zdraví, popř. jak nalézt nejsnadnější způsob jejich zachytu či odbourávání.

Druhý den školy účastníky přivítá Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i., kde je čeká pohled na strukturu a fyzikálně – chemické vlastnosti nanočástic. V praktických cvičeních si otestují, jak fyzikální vlastnosti ovlivňují funkčnost nanomateriálů. Studenti také budou mít možnost detailně se seznámit s mikroskopickou technikou pro určování tvaru a velikosti nanočástic a práci s reaktivními sorbenty.

S využitím nanočástic v praxi se studenti seznámí třetí den v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., kde budou mít možnost nahlédnout do laboratoře elektroniky a sensorů. Studenti si prakticky vyzkouší přípravy sensorů na bázi grafenu nebo se seznámí s metodou přípravy zpevňovacích nano-gelů. Ty jsou využívány při restaurování památek. Nové zkušenosti si také odnesou z oblasti fotokatalytického odbourávání polutantů z vody i ze vzduchu.

Praktická cvičení nejsou jedinou náplní letní nanoškoly. Na každém ústavu jsou připraveny odborné přednášky z různých oborů, které s danou problematikou souvisí. Diskuzní fórum v posterové sekci nabízí prostor studentům k rozhovorům s vědeckými pracovníky o tématech, jež je v daném oboru zajímaví.

„Studenti tak během letní nanoškoly nenucenou formou získají přehled o tom, jaké experimentální techniky jsou k dispozici pro syntézu, charakterizaci a testování nanostrukturních materiálů,“ doplňuje hlavní organizátorka Dr. Ing. Kateřina Minhová Macounová z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR.

V Heyrovského ústavu se věnují studiu kalixarenů. Unikátní molekuly dokáží do sebe pojmout další látky a tím je zachytit, případně přenášet. Využití najdeme např. v analytické chemii či v medicíně

V pražském Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského se tým vědců kolem profesora Ludvíka v Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy už pět let věnuje zkoumání kalixarenů. Základní struktura kalixarenů představuje stabilní trojrozměrnou "kostru". Když se na ni navážou vhodné chemické skupiny, vzniklou molekulu lze elektrochemicky redukovat za vzniku aniontových radikálů majících překvapivé vlastnosti. Právě molekulám s větším počtem reaktivních center a jejich vzájemným interakcím se skupina profesora Ludvíka věnuje. O objevech v chování kalixarenů pravidelně referují na mezinárodních kongresech a publikovali řadu prací v mezinárodních časopisech. Letos vychází zásadní studie v prestižním periodiku „Current Opinion in Electrochemistry“ a další rukopisy jsou připraveny k odeslání.

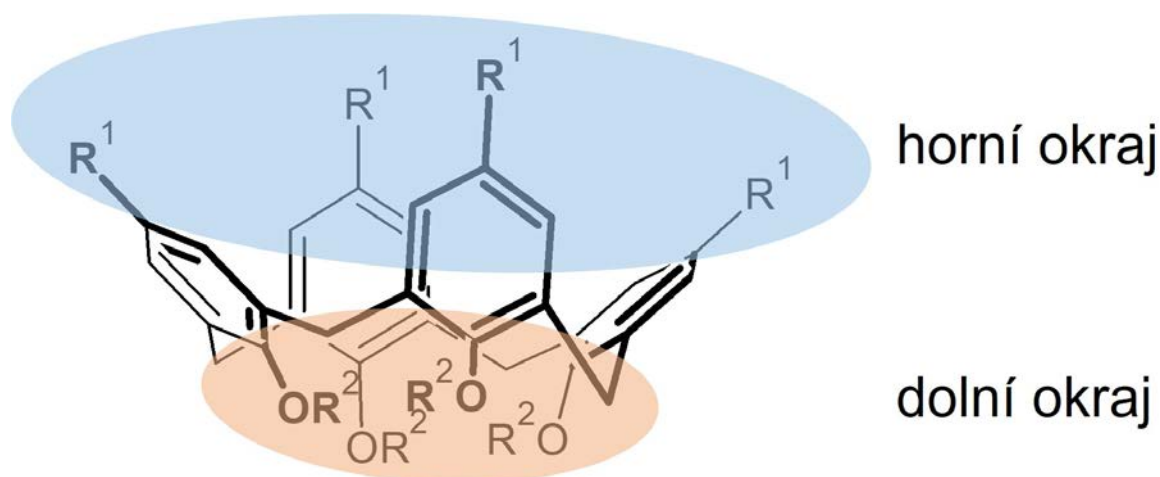
Praha, 30. července 2018

Profesor Jiří Ludvík a jeho spolupracovníci se v Heyrovského ústavu již řadu let zabývají elektrochemickým studiem nově syntetizovaných molekul. Kromě základní charakterizace jejich oxidovatelnosti, redukovatelnosti a následné reaktivity v roztoku, se tým molekulární elektrochemie zaměřuje na rozložení a míru delokalizace elektronů v těchto molekulách, na stabilitu radikálových meziproduktů a na vztah mezi strukturou molekuly a její reaktivitou. Jde tedy o detailní výzkum, který pomáhá pochopit ty vůbec nejzákladnější principy a mechanismy chemických dějů. Studovanými molekulami jsou organické a organometalické sloučeniny nejrůznějších typů s využitím v medicíně, zemědělství, v průmyslové katalýze, v analytické chemii, fotovoltice, apod., proto skupina spolupracuje s týmy, kde se tyto nové látky syntetizují (VŠCHT, Univerzita Karlova, Univerzita Pardubice, Ústav organické chemie a biochemie a další).

„V naší laboratoři molekulární elektrochemie se setkáváme s nejrůznějšími látkami, které jsou vyvíjeny jako nadějně léky, katalyzátory, barviva, ekologické agrochemikálie, světelně citlivé látky či senzory. Po jejich syntéze býváme první, kteří elektrochemicky zkoumají jejich vlastnosti a naše výsledky jsou pak korelovány s požadovanými účinky, aby bylo možné je v budoucnosti uplatnit v praxi. S VŠCHT např. spolupracujeme na studiu rakovinnosti některých sloučenin, s pardubickou univerzitou jsme testovali nové látky pro nelineární optiku, s kolegy z UOCHB se zabýváme látkami vykazujícími efekt singletového štěpení pro zvýšení účinků solárních baterií apod.“ vysvětluje Ludvík.

Pomyslnou červenou nití Ludvíka a jeho kolegů však zůstává zkoumání jednotlivých izolovaných molekul v roztoku, hlavně těch, které mají více reakčních center. Mohou tak dostat odpovědi na otázky, jak tato centra spolu v rámci jedné molekuly komunikují, jak se vzájemně ovlivňují a jak se to odrazí v konečných vlastnostech molekuly. Právě sem patří jejich spolupráce s prof. Lhotákem z VŠCHT (Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc., Ústav organické chemie FCHI, VŠCHT Praha) zaměřená na kalixareny. Tyto molekuly obsahují čtyři benzenová jádra propojená do kruhu, takže jejich struktura připomíná kalich (= kalix). Pomocí vhodné substituce na horním a dolním okraji toho pomyslného kalicha lze v rámci molekuly vytvořit místa, prostory, do kterých se vejde určitá další molekula nebo ion a tam se zachytí. Kalixaren tak slouží jako hostitel, který v sobě příslušnou molekulu (hosta) "ubytuje". Vzniká tak tzv. supramolekula, která může sloužit jako "vychytávač" analyzovaných molekul (senzor) nebo jako jejich zásobník, případně přenašeč (např. v případě léků).

Současně se ale na základě elektrochemických experimentů ukázalo, že v roztoku mají některé kalixareny tvar kalicha silně zploštělého, navíc pulzujícího. Tímto jevem a způsoby, jak jej lze ovlivnit typem a polohou substituentů, se zabývá právě publikovaná práce v prestižním časopise „Current Opinion in Electrochemistry“, která zavádí novou disciplínu "stereo elektrochemii".



„Stále s úžasem zjišťujeme, jak je elektrochemický experiment na molekulární úrovni bohatý na informace. Tato historie začala překvapivým experimentálním zjištěním, že formálně stejná čtyři reakční centra na některých kalixarenech ve skutečnosti nejsou rovnocenná, ale tvoří dva rozdílné páry. Z toho jasně plyne, že domněle kulatý kalíšek má tvar jako by na něj někdo z boku šlápl. Pak se ale do něj toho moc nevejde, že. Tento jev byl pak potvrzen kvantově chemickými výpočty. Za těch pět let, co se věnujeme výzkumu kalixarenů, měl kolega Alan Liška v ruce na sto derivátů. Tak jsme měli dost materiálu na to, abychom mohli popsat, co dokáže elektrochemický experiment říct o tvaru a struktuře konkrétní molekuly, případně o jejím chování v roztoku,“ upřesňuje Ludvík. „Ta zmíněná letošní publikace tak shrnuje všechny naše dosavadní poznatky. Právě experimentální důkaz o zploštělosti některých kalixarenů v roztoku bude vyžadovat určitou revizi představ o roli kalixarenu jako hostitele,“ vysvětluje vědec.

Jeden z posledních objevů týmu prof. Ludvíka je využití kalixarenu v jeho redukované formě jako pasti pro zachycení iontů některých těžkých kovů. Principy a návrhy, které by v tomto směru mohly být využitelné, se vědci chystají vysvětlit v dalších připravovaných publikacích ve vědeckých periodikách Chemical Communication a Electrochemica Acta.

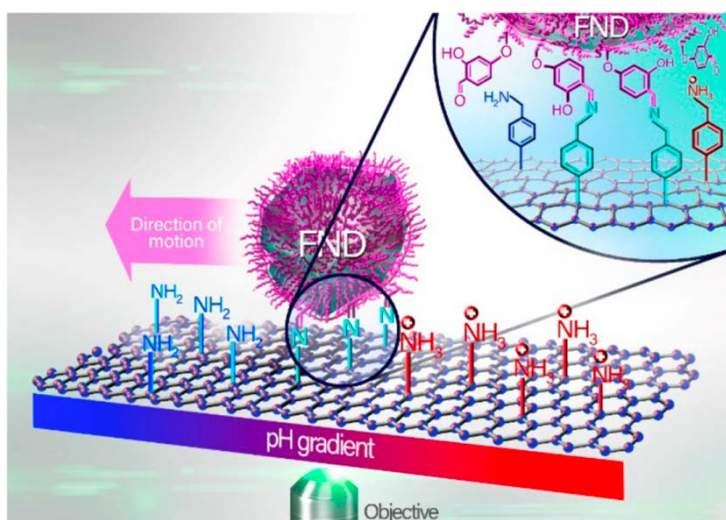
„V těchto článcích se budeme věnovat nové roli kalixarenů jako elektrochemicky vytvářených receptorů. Všechny tyto získané poznatky bude však třeba prakticky ověřovat ještě na dalších systémech. Pokud se předpoklady potvrdí, pak při ukotvení kalixarenů na elektrodu by mohlo jít o funkční řešení, jak například selektivně "vychytávat" radioaktivní ionty z radioaktivních odpadů,“ vysvětluje Ludvík a dodává: „Z toho všeho je zřejmé, že podstatou a hlavním úkolem základního výzkumu je objevovat a popisovat nové jevy a principy, bez nichž by nebylo možné rozvíjet nové technologie a aplikace.“

Vědcům z Heyrovského ústavu se jako prvním podařilo kontrolovaně rozpohybovat nanočástice na povrchu grafenu. Jejich zprávu publikoval prestižní časopis ACS Nano, užitná bude i v nanorobotice

Českým vědcům z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR se podařilo kontrolovaně uvést do pohybu nanočástice na povrchu grafenu. To se dosud pro svou náročnost a delikátnost žádnému vědeckému týmu na světě nepodařilo. Princip tohoto pohybu je navíc zobecnitelný i na jiném povrchu. O svém úspěchu teď vědci publikovali článek v americkém odborném časopise ACS Nano, který se specializuje na nanovědu.

Praha, 20. června 2018

Vědci z týmu Nízkodimenzenálních systémů měli zdánlivě jednoduchý úkol: dostat do pohybu nanočástičku z bodu A do bodu B na povrchu, přičemž bude tento pohyb přímo pozorovatelný. Řešit přitom museli poměrně zásadní protichůdné parametry: částice na tomto povrchu musela držet a „neutéct“ z něj, zároveň však ne příliš pevně, aby s ní bylo možné pohybovat. „Grafen jsme zvolili nejen pro jeho unikátní vlastnosti, ale také proto, že ho velmi dobře známe. Víme, jak s ním pracovat, umíme na něm vyvinout potřebné chemické reakce a také víme, jak ho studovat. Povrch grafenu je navíc hladký – nanočástice, které jsme chtěli uvést do pohybu, tak nemusely překonávat žádné náročné překážky,“ vysvětluje Petr Kovaříček, který projekt pod Martinem Kalbáčem přímo vyvinul.



Obr. 1.: Schematické znázornění experimentu pohybu nanočástice po povrchu grafenu, FND je zkratka pro fluorescenční diamant
(Zveřejněno se souhlasem ACS Nano, American Chemical Society 2018)

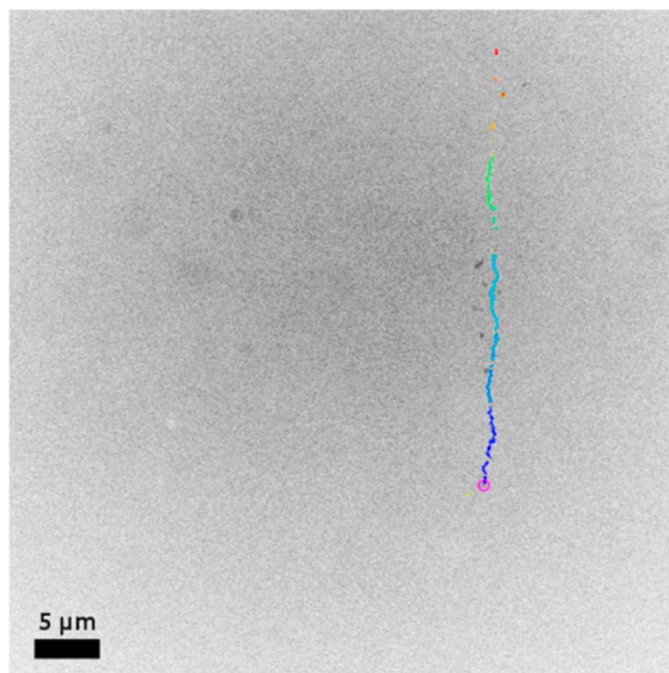
Kromě dobré znalosti grafenu jako povrchu však hrál roli i fakt, že tým chtěl celý pokus pozorovat napřímo, v reálném čase. K tomu byla zapotřebí fluorescenční mikroskopická technika, a tím pádem i průhledný povrch, na kterém bylo možné experiment uskutečnit - to grafen také splňuje.

Zmíněnou mikroskopickou techniku, která byla pro sledování pohybu nanočástic potřebná, poskytuje oddělení biofyzikální chemie v rámci Heyrovského ústavu, výroba užitých nanočástic je však samostatná vědní disciplína. Tým Petra Cíglera z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR vyvíjí fluorescenční diamantové nanokrystaly, které byly pro tento projekt použity. Musely však splňovat několik podmínek: nést na svém povrchu vhodné chemické skupiny umožňující uchycení a pohyb po grafenu a být velmi odolné vůči degradaci světlem. Chemii pro pohyb částice po povrchu pak vyvíjel Kovaříčkův školitel Jean-Marie Lehn ze štrasburské univerzity, který se zabývá dynamickou kovalentní chemií.

Vědecký tým zatím pozoroval jen jeden způsob pohybu – lineární. Dalším krokem výzkumu tak bude zjistit, jak v nanoměřítku vytvořit dráhu složitější a vést částici po povrchu jinou než lineární cestou. Na to je však potřebné užití více působných sil.

HODNOCENÍ HLAVNÍ ČINNOSTI

Zveřejnění této publikace v časopise ACS Nano je úspěšným prvním krokem pro využití pohybu nanočástic v budoucnu. Ty budou moci být použity třeba při přenosu informací nebo molekul. Kovaříček však upozorňuje, že výzkum je teprve v začátcích. „Náš výzkum tým ani nebyl motivovaný – snažili jsme se zvládnout techniku na úrovni, kde to doposud nebylo možné. Je však zřejmé, že princip pohybu je využitelný i v jiných aplikacích – od nanorobotiky, přes biomedicínské použití po nanovědy obecně,“ uzavírá Kovaříček.



Obr. 2.: Zdokumentovaný pohyb nanočástice po grafenu – modrá značí začátek, červená konec trajektorie (Zveřejněno se souhlasem ACS Nano, American Chemical Society 2018)

Heyrovského ústav dosáhl na prestižní grant ERA Chairs v rámci programu Horizont 2020. Stává se tak teprve druhým pracovištěm v Česku, které na tyto prostředky dosáhlo

Heyrovského ústav Akademie věd ČR získal prestižní grant Evropského výzkumného prostoru ERA Chairs. Ten pomáhá pozvednout vědecké instituce mezi ty nejlepší na světě. Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského je teprve druhým vědeckým centrem u nás, kterému se podařilo na toto prestižní financování dosáhnout. Celkem dostane k dispozici necelých 2,5 milionu Eur (přes 60 milionů korun), které využije mimo jiné pro získání světově uznávané vědecké osobnosti. Ta vzejde z mezinárodního výběrového řízení a měla by sestavit tým, který se bude na ÚFCH JH věnovat výzkumu chemické nanokatalýzy.

Praha, 2. května 2018

Cílem programu ERA Chairs je umožnit evropským institucím získat prvotřídní akademiky, kteří dokáží pozvednout konkrétní výzkumné oblasti na nejvyšší světovou úroveň. Dosáhnout na něj můžou vědecké instituty z těch zemí Evropské unie, které se přidaly po roce 2004. Ty navíc doplňuje Lucembursko, Portugalsko a dalších osm států mimo EU. Heyrovského ústav je teprve druhou institucí v Česku, která na toto financování dosáhla. Dalším byl brněnský CEITEC, který v roce 2014 grant využil na výzkum RNA a imunity.

„Program ERA Chairs může překonat hlavní handicap, který má většina výzkumných ústavů v Praze ve srovnání s evropskými metropolemi, které jsou hlavními aktéry na poli vědy. Mzdová úroveň je o 70 % nižší ve srovnání s Německem, což není pro zkušené výzkumníky, ale ani mladé vědce nebo post-doktorandy příliš atraktivní. V období od roku 1997, kdy jsem nastoupil do našeho ústavu, a pravděpodobně i před tím, bylo obtížné nalézt pro pražské instituce vědce světového formátu na definované výzkumné projekty. Zatímco němečtí kolegové mohou najímat pro své projekty nejlepší adepty, naše ústavy si musí vychovat vlastní vědce samy, což trvá podstatně delší dobu. Tento handicap zpomaluje vědeckou kariéru, a to je jedním z důvodů nízké míry úspěšnosti experimentálních vědeckých pracovníků při získávání ERC advanced grantů. Možnosti financování OP VaV v posledních letech již tuto situaci zlepšily v Brně, Olomouci a dalších českých městech, ale nikoliv v Praze, která byla z těchto soutěží vyloučena,“ říká Martin Hof, ředitel ústavu.

Heyrovského ústav se chce pomocí grantu soustředit zejména na získání vědeckých kapacit z oblasti nanotechnologie. Reaguje tak na rostoucí trendy ve světě vědy, kde se výzkumu nanotechnologií dostává čím dál většího prostoru a významně rozšiřuje své stávající aktivity v této oblasti. Grant zároveň vědcům pomůže v dalším rozvoji klíčové oblasti chemické katalýzy, ve které už nyní představuje Ústav J. Heyrovského mezinárodně uznávanou autoritu.

„Naše konkrétní představy o daném vědci či vědkyni byly součástí návrhu projektu, na základě kterého nám byl grant přidělen. Obecně se má jednat o uznávanou vědeckou osobnost, která má relevantní zkušenosti ze špičkových zahraničních pracovišť, a kromě zavedení nového oboru a vytvoření nového týmu v nanokatalýze, naváže na úspěšné aktivity ústavu v oblasti nanotechnologií a nanomateriálů a rozšíří naši vědeckou kompetenci v těchto oblastech. Všechny tyto faktory jsou pro vývoj našeho ústavu a pro jeho etablování se mezi světovou špičku velmi důležité. To, že očekáváme, že J. Heyrovský chair se v celé své kapacitě bude věnovat práci na ústavu, a plně se identifikuje s jeho cíli, je také důležitým aspektem našeho projektu,“ uvedl Jan Hrušák, koordinátor projektu.

Výběrové řízení vyhláší ústav právě v těchto dnech, využije pro to inzertní prostor v předních světových vědeckých časopisech a odborných webech. Všichni vhodní zájemci pak projdou dvoukolovým výběrovým procesem. Hrušák očekává, že do druhého kola by mohlo postoupit až 5 nejvhodnějších uchazečů – ti by pak v Praze prezentovali své dosavadní vědecké zkušenosti. Nad výběrem nejvhodnějšího kandidáta nakonec zasedne mezinárodní panel odborníků. Projekt zahrnuje i pět dalších externích spolupracovníků, kteří nově vznikající tým doplní. Mezi nimi by měli dostat prostor i Češi, pohovory a obsazování těchto pozic bude probíhat souběžně s konkurzem na vedoucí pozici. Heyrovského ústav navíc uvolnil další personální kapacity a vlastní finanční prostředky určené k přestavbě laboratorních prostor a nákupu vybavení.

„Předpokládáme, že výběrové řízení bude ukončeno počátkem července, kdy má podle grantové dohody začít financování. Snažíme se náš projekt trochu uspišit, protože většina ostatních vybraných projektů v rámci ERA Chairs startuje až v září,“ dodal Hrušák.

HODNOCENÍ HLAVNÍ ČINNOSTI

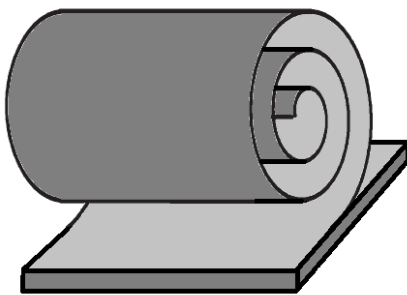
O grant ERA Chairs se v aktuálním období ucházelo 100 projektů, hodnoceno jich nakonec bylo 96. Heyrovského ústav je jednou ze 13 úspěšných institucí, další granty putují do Lucemburska, Portugalska, Polska, nebo třeba na Slovensko. Vůbec nejúspěšnější zemí je však Estonsko, to získalo granty rovnou čtyři. Data poskytlo Technologické centrum AV ČR.

Vědcům z Heyrovského ústavu se podařilo ovládat pohyb uhlíkové nanorole – materiálu, který může v budoucnu nahradit práci svalů v lidském těle

Českým vědcům se podařilo experimentálně dokázat do této doby pouze teoreticky předpokládaný jev – rozvinování a svinování uhlíkové nanorole. I když do dnešního dne existovaly hypotézy a simulace, Pavel Janda se spolupracovníky z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR jsou prvními, kterým se podařilo pohyb nanorole experimentálně řídit. O svém objevu teď vědci publikovali článek v odborném časopise *Physical Chemistry Chemical Physics* (PCCP). Nanorole, tvořená svinutými listy grafenu, by tak mohla v budoucnu získat významné místo v nanotechnologiích.

Praha, 4. dubna 2018

Princip nanorole je jednoduchý, jedná se o ruličku svinutého grafenu, která by vzdáleně mohla připomínat pérko do hodinek. Její unikátní vlastností je schopnost převádět elektrické napětí na pravidelný opakovaný pohyb rozvinování a zavinování. Toto "cvičení" nanorole se jeví jako ideální pro využití například v biomedicinském inženýrství. Nahradit by tak mohla třeba svalová vlákna. V zavinutém stavu má totiž nanorole průměr v rozsahu jednotek nanometrů, její délka se pak pohybuje od stovek nanometrů až po několik mikronů a k rozvinutí stačí napětí několika desetin voltu.



Obr. 1.: Schematický obrázek uhlíkové nanorole

„I když je její širší využití v biomedicině zatím pouze vzdálenou budoucností, potenciál nanorolí nelze zpochybnit. Lidské tělo je plné elektrolytu, což je prostředí, kde nanorole pracuje. Když připočteme její biokompatibilitu a odolnost, máme tu potenciálně ideální náhradu pohybovačů,“ vysvětluje Pavel Janda.

Ten společně s Hanou Tarábkovou a Zdeňkem Zelingerem dlouhodobě zkoumá vlastnosti grafitového povrchu. O pohybových vlastnostech uhlíkových nanorolí se zmiňovaly teoretické hypotézy již dříve, nikdo je však dosud nepotvrdil pozorováním v experimentu. Pohyby nanorole jsou viditelné pouze speciálním mikroskopem, který je schopen pracovat ve vodném prostředí.

„Momentálně se nacházíme v prvotní fázi výzkumu. Článkem, který jsme v britském časopise *Physical Chemistry Chemical Physics* publikovali, dáváme k dispozici vědecké obci základy, na kterých se v dalších výzkumech dá stavět,“ upřesňuje Tarábková.

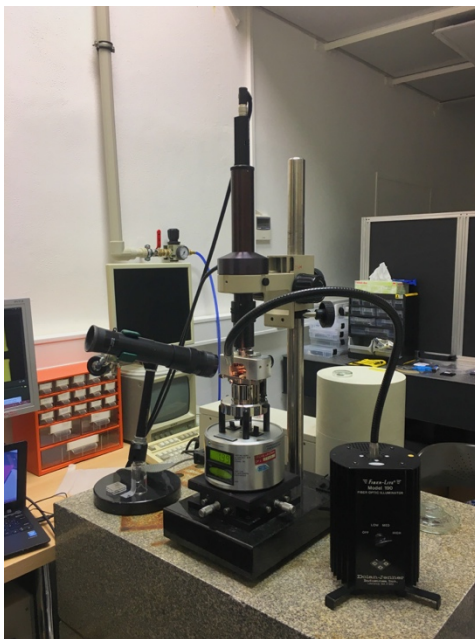
Dosud vědci pracovali s nanoruličkami spontánně vzniklými na povrchu grafitu, v budoucnu se chtějí zaměřit na studium nanoruliček připravených na míru. tj. s definovanou délkou a počtem závitů. To je jeden z mnoha důležitých kroků směrem k jejich praktickému využití.

„Aplikovaný výzkum a z něho vycházející případné uplatnění v praxi jsou založeny na úspěšnosti základního výzkumu,“ vysvětluje Janda. „Naši práci teď bude dokázat, že investice do dalšího výzkumu pohybu nanorolí má smysl.“

I když se jedná o počátky výzkumu, víze se nedrží při zemi. Biomedicinské inženýrství je jen jednou z oblastí, kde by nanorole našly své uplatnění, další oblastí je robotika a konstrukce mikroelektromechanických zařízení (MEMS). Hovoří se např. o nanoventilu, kde postupné stahování závitů nanorole může regulovat mikroskopické průtokové cesty, nebo o nanopumpě, která by

HODNOCENÍ HLAVNÍ ČINNOSTI

periodickými koordinovanými stahy umožnila transportovat velmi malá množství tekutin. Stejně jako v biomedicině se však zatím jedná o budoucnost, které čeští vědci úspěšně vyrazili naproti.



Obr. 2.: Mikroskop atomárních sil, kterým jsou pohyby nanorole pozorovatelné

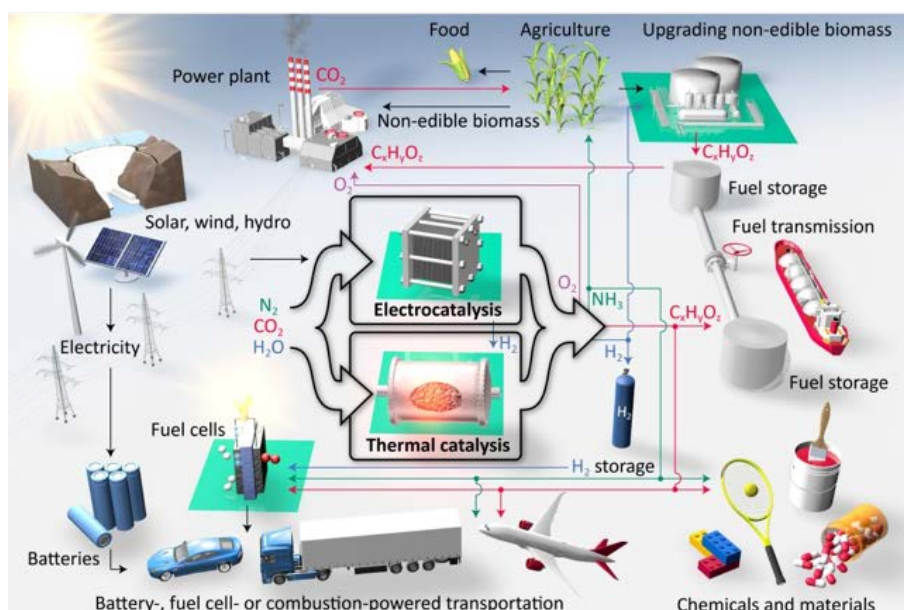
Budoucnost je ve vodíku. Na vědce z Heyrovského ústavu spoléhá nové evropské konsorcium Energy-X

Zbavit společnost závislosti na fosilních zdrojích - i tak by se dala shrnout práce skupiny vědců z pražského Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR. Na jejich zkušenosti v oblasti elektrochemie nyní spoléhá nově založené evropské konsorcium Energy-X, jehož cílem je úplná nezávislost kodaňského letiště Kastrup na fosilních palivech. Docílit toho půjde i díky elektrolýze vody a následnému získání vodíku, který dokáže uchovat a přenášet energii i z obnovitelných zdrojů. Vědci z Prahy využijí své odborné znalosti z mezinárodního projektu Elcorel, který vedou.

Praha, 5. března 2018

I když je závislost lidstva na fosilních zdrojích dlouhodobě neudržitelná, zatím neznáme lepší způsob, jak energii vyrobit a zároveň uchovat. Ekologické varianty jsou sice všudypřítomné a relativně dostupné, energie z nich je však využitelná buď okamžitě, nebo vůbec. To se pokouší změnit tým vědců z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského pod vedením doc. Dr. Petra Krtily.

„Česká ekonomika ročně spotřebuje přes 400 terawatthodin energie, to je ekvivalent asi dvacetinásobku výkonu Temelína. Tato spotřeba je kryta fosilními palivy až ze 70 %, vyřešit ukládání elektrické energie z obnovitelných zdrojů je tedy nutností pro změnu energetické bilance,“ vysvětluje Krtíl a dodává: „Nikdo dnes není schopen přesně říci, za jak dlouho se budeme muset spoléhat čistě na energii z obnovitelných zdrojů. S jistotou však můžeme tvrdit, že tato situace nastane. Najít efektivní a ekonomickou cestu pro ukládání „zelené“ energie proto musíme.“



Obr. Grafické znázornění procesu elektrolýzy vody a následného využití vodíku jako zdroje energie

Tímto řešením je elektrolýza vody. Ta pomůže získat vodík, který bude následně využitelný k přímé generaci elektřiny, výrobě tepla či jako surovina v chemických výrobcích. V současné době se výzkum zaměřuje na nalezení dostatečně stabilního katalyzátoru, který bude zároveň ekonomicky smysluplný.

Na zrodu energetické revoluce lidé z Heyrovského ústavu nepracují sami, koordinují totiž činnost celoevropského konsorcia Elcorel, které má elektrochemickou konverzi obnovitelné elektrické energie na vodík v kompetenci. Kromě výzkumu se soustředí i na vzdělávání. V české historii se jedná o projekt ojedinělý, žádný vědecký ústav zatím projekt s tak velkým mezinárodním přesahem neřídil.

Díky zkušenostem v Elcorelu byli vědci přizváni do dalšího konsorcia pojmenovaného Energy-X. To zahajuje svou činnost právě v těchto dnech a jeho ambice nejsou malé – zajištění provozu jednoho z

nejvytíženějších evropských letišť zcela bez fosilních zdrojů, a to i za pomoci zmiňovaného vodíku. Během následujících deseti let se počítá s technologickým návrhem, který propojí energii generovanou z obnovitelných zdrojů s následnými katalytickými procesy. Ten zajistí nejen napájení vzdušných přístavů, ale i zásobování letadel kerosinem.

„Jako příklad může posloužit kodaňské letiště Kastrup. To pro projekt nebylo vybráno náhodou. Skandinávské země jsou známé svým vysokým využíváním “zelené” energie, kterou lze snadno využít k demonstraci životaschopnosti vyvíjených technologií v průmyslovém měřítku,“ vysvětluje Krtil.

V budoucnu však nezůstane pouze u letišť a velkých firem, Krtil si dovede představit malé konverzní jednotky založené na využití vodíku v běžných domácnostech. Implementace do domovů by byla mnohem jednodušší než u velkých podniků. Nutná je však změna lidského přístupu.

„Masivní využití technologií nahrazujících fosilní paliva látkami získanými konverzí “zelené” energie může dnes znít téměř jako science fiction. Přesto je blíž, než si řada z nás možná myslí. Nakonec, není to tak dávno, kdy jsme si nedokázali představit, že u sebe budeme nosit mobilní telefony. Dnes jsou mobilní technologie naprosto běžné a firmy, které tyto služby poskytují, patří k těm nejziskovějším. V oblasti “zelené” energie je situace podobná. Navíc víme, že naše směřování je dlouhodobě neudržitelné, a proto je třeba aktivně hledat mezi alternativními zdroji. Jiné varianty teď nemáme,“ uzavírá Krtil.

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

Ústav se v roce 2018 podílel na školení **50 doktorandů** (v presenční a kombinované formě studia; z tohoto počtu v průběhu roku 2018 obhájili disertační práci 4 studenti); **30 vysokoškolských studentů** (bakaláři, magistři, diplomanti) bylo školeny vědci z ústavu v rámci svých bakalářských a diplomových prací.

Školení studenti každoročně prezentují výsledky svých stáží (bakalářské, diplomové práce, disertační práce) na studentské konferenci nazvané **Seminář studentů ÚFCH JH**. Konference se v roce 2018 uskutečnila v konferenčním sále ÚFCH JH (12. - 13. 6. 2018). Své prezentace, převážně v anglickém jazyce, předneslo 35 VŠ studentů (z toho 8 zahraničních). Konference se dále v roli posluchačů zúčastnilo více než 35 vědců ústavu. Studentské příspěvky shrnuje sborník na adrese http://web.jh-inst.cas.cz/index.php/jh_meeting/seminar-of-students-2018-photogallery.

Na **výuce** studentů bakalářského, magisterského a DSP studia (postgraduální studenti) se **na desítku vysokých škol** podílely tři desítky vědeckých a odborných pracovníků ústavu a v průběhu *letního/zimního* semestru bylo celkem odpřednášeno 560/1045 hodin v 23/46 semestrálních cyklech přednášek, seminářů a cvičení.

15 vědeckých pracovníků bylo v roce 2018 členy oborových rad doktorského studia a 15 vědeckých pracovníků bylo členy komisí pro státní bakalářské, závěrečné a rigorózní zkoušky v oboru fyzikální chemie a obhajoby disertačních prací na několika universitách a vysokých školách (PřF UK v Praze, ČVUT v Praze, VŠCHT v Praze, Univerzita Pardubice, Masarykova Univerzita v Brně, Palackého Univerzita v Olomouci, Jihočeská Univerzita v Českých Budějovicích).

Pracovníci ústavu v roce 2018 opět úspěšně spolupracovali na řešení **17 grantových projektů společně s vysokými školami** v roli řešitelů/spoluřešitelů grantových projektů.

Další vzdělávací a současně popularizační činnosti, které se ústav od roku 2005 věnuje intenzivně nad rámec každodenní badatelské činnosti, je vzdělávání **středoškolské mládeže** a práce s talentovanými SŠ studenty, kteří se zajímají o studium přírodních věd (přednášky, exkurze, workshopy, stáže a praxe). Pro středoškolskou mládež bylo v roce 2018 předneseno celkem 87 hodinových přednášek na různá témata z oboru fyzikální chemie. Studenti, kteří středoškolské stáže vykonali v ústavu, své práce obhájovali v různých soutěžích, např. SOČ či Amavet, školní ročníkové či maturitní práce (celkem dvacítky prací; několik studentů se probojovalo až do celostátního kola SOČ a jeden student, v oboru biologie, skončil se svou SOČ prací na 3. místě).

V roce 2018 ústav rovněž pokračoval v programech zaměřených na **vzdělávání žáků základních škol** (výuka experimentováním, workshopy) a **předškoláků z mateřských škol** (chemické divadlo). Ústav již takto spolupracuje s více než stovkou škol (SŠ, ZŠ a MŠ) z regionů ČR, včetně Prahy. Při vzdělávání mládeže ústav pravidelně spolupracuje např. také s Odborem projektů a grantů AV ČR (projekt *Otevřená věda AV ČR 2018*), Národním institutem dalšího vzdělávání MŠMT (programy vzdělávacích návštěv ústavu *Den (s) vědcem*), s Nadačním fondem Jaroslava Heyrovského (*soutěže SOČ*) či Goethe Institutem v Praze (soutěž *Bystré hlavy*), aktivně ústav řeší některé společné projekty se středními školami (např. BiGy Žďár n. Sázavou, MSSCH z Prahy 1

aj.). Popularizaci výsledků VaV se věnují pravidelně aktualizované stránky s adresou <http://www.jh-inst.cas.cz/3nastroje> či <http://www.jh-inst.cas.cz/heyrovsky>.



Vzdělávací programy: chemické kursy ústav pořádá i pro žáky ZŠ a předškoláky. (obrázek vlevo nahoře), Každoroční týdenní srpnová nanoškola do ústavu přivede třicítku nadaných žáků se zájmem o přírodovědné obory. (obrázek vpravo nahoře), Na své odborné stáže jezdí do ústavu středoškoláci z celé České republiky a spektrum laboratoří a vědců, jež se jim věnují, se stále rozrůstá (obrázek vpravo dole).



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

Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané řešením projektů

V roce 2018 ústav řešil čtyři projekty v rámci spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi

Účinné průřezy pro elektronové kolize s plynem Novec 4710

Program: Náhrada SF₆ v rozvaděči

Výsledek: Sada účinných průřezů pro srážky elektronů s plynem Novec 4710

Uplatnění: Sada účinných průřezů je používána firmou Eaton, která s nami spolupracuje, k modelování dielektrických vlastností ve vysokonapěťových rozvaděčích.

Poskytovatel: Technologická agentura ČR

Partnerská organizace: Eaton Elektronika s.r.o.

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

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

Výsledek: Komerční mikrokrystallický NMC materiál bych mechanicky a tepelně opracován procedurou vyvinutou HE3DA v průběhu řešení projektu. Byl studován vliv morfologie materiálu na jeho elektrochemické chování, zejména nábojovou kapacitu a cyklickou stabilitu. Optimalizované vzorky měly nábojovou kapacitu 141 mAh/g (stanovenou pomocí cyklické voltametrie) and 144 a 135 mAh/g (stanovenou pomocí galvanostatické chronopotentiometrie) při rychlosti polarizace 1 a 10C.

Uplatnění: Automobilový průmysl

Poskytovatel: Ministerstvo průmyslu a obchodu České republiky

Partnerská organizace: HE3DA, s.r.o.

Publikace: Zukalová, Markéta, Procházka, J., Pitňa Lásková, Barbora, Zukal, Arnošt, Kavan, Ladislav. Layered LiNi_{1/3}Mn_{1/3}Co_{1/3}O₂ (NMC) with Optimized Morphology for Li-Ion Batteries. *ECS Transactions*. 2018, 87(1), 67-75. ISSN 1938-5862 doi: 10.1149/08701.0067ecst

Bílá cementová fotokatalytická stěrka

Program: Inovativní fotokatalytické stěrky a přísady do betonu /program TRIO

Výsledek: Bílá cementová stěrka se solární fotokatalytickou samočisticí a antimikrobiální schopností

Uplatnění: Nátěry

Poskytovatel: Ministerstvo průmyslu a obchodu České republiky

Partnerská organizace: BETOSAN, s.r.o.

Publikace: Žouželka, Radek, Remzová, Monika, Brabec, Libor, Rathouský, Jiří. Photocatalytic performance of porous TiO₂ layers prepared by quantitative electrophoretic deposition from organic solvents. *Applied Catalysis B - Environmental*. 2018, 227(JUL 2018), 70-78. ISSN 0926-3373 doi: 10.1016/j.apcatb.2018.01.035

Variace ve vydechovaném acetonu a dalších ketonech u pacientů podstupujících bariatrickou operaci

Program: Analýza dechu pomocí SIFT-MS

Výsledek: Výsledky potvrzují, že ketony obsažené v dechu představují klinicky užitečnou metodu neinvazivního nutričního hodnocení u obézních pacientů.

Uplatnění: Metoda neinvazivního nutričního hodnocení u obézních pacientů.

Poskytovatel: St Marys Hospital London

Partnerská organizace: Imperial Coll London, Dept Surg & Canc, London, England

Publikace: Boshier, P. R., Fehervari, M., Markar, S. R., Purkayastha, S., Španěl, Patrik, Smith, D., Hanna, G. B. Variation in Exhaled Acetone and Other Ketones in Patients

Undergoing Bariatric Surgery: a Prospective Cross-sectional Study. *Obesity Surgery*. 2018, 28(8), 2439-2446. ISSN 0960-8923 doi: 10.1007/s11695-018-3180-5

Výkonové světelné zdroje

Program: Vývoj zařízení Thermo-profil a Foto-profil pro individuální identifikaci zadržených drogových zásilek a směsí

Výsledek: Cílem projektu je podpořit vývoj zcela nových typů velmi výkonných a robustních pevnolátkových světelných zdrojů využívajících jedinečných vlastností monokrystalických materiálů. Nové světelné zdroje mají sloužit jednak k rozšíření portfolia takových produktů firmy Crytur, které mají vysokou přidanou hodnotu a zároveň demonstrovat širokému spektru potenciálních zákazníků výhody aplikace jedinečných monokrystalických materiálů produkovaných společností CRYTUR pro využití ve vysoce výkonných, robustních a trvanlivých světelných zdrojích. Nový typ produktu vyvinutého v rámci projektu umožní rozšířit existující portfolio zákazníků o společnosti zabývající se výrobou výkonných světelných zdrojů pro technické, vědecké, bezpečnostní a dopravní aplikace.

Uplatnění: Spolupráce si klade za cíl vyvinout rychlé a jednoduché analytické metody Thermo a Foto-profil pro chemickou profilaci a porovnávání drogových zásilek. Principem je digitalizace a porovnání shodnosti chemických profilů a přiřazení vzorků obsahujících příměsi stejného chemického složení a shodných poměrů pocházejících od téhož distributora. Cílem je analýzu provádět rychle, levně, efektivně a implementovat do kriminalistické sbírky stop, do celosvětové kriminalistické sbírky Reliéf v rámci činnosti Interpolu v oblasti boje proti mezinárodnímu obchodu s drogami. Dlouhodobým cílem pilotního výzkumu je také získat pro tento výzkumný a vývojový záměr grantové finanční prostředky.

Poskytovatel: Technologická agentura ČR

Partnerská organizace: CRYTUR, spol. s r.o.

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

Ústav v roce 2018 pokračoval v plnění závazků 2 hospodářských smluv o dílo (tuzemské a zahraniční podnikatelské a jiné subjekty). V rámci plnění těchto smluv byly dosaženy výsledky, převážně předané ve formě výzkumných zpráv.

Hodnocení povrchu korozní vrstvy vzorků Zr slitin metodou AFM

Zadavatel: UJP-Praha a.s.

Anotace: Výsledkem je srovnávací nanomorfologické hodnocení povrchů Zr –slitin po expozici v korozní atmosféře odpovídající prostředí jaderného reaktoru. Vznik gelové formy oxidu, kompaktnost povrchu, parametrické zpracování topografických AFM obrazů povrchu, profilová analýza a vytvoření parametrické charakteristiky povrchů jednotlivých vzorků (metoda „fingerprint“).

Uplatnění: Výsledky hodnocení jsou uplatňovány při výběru slitin pro výrobu palivových trubek.

Ověření účinnosti vrstev Protectam FN nanesených na stavebním materiálu při odstraňování NO_x ze vzduchu

Zadavatel: Advanced Materials - JTJ, s.r.o.

Anotace: V provedeném výzkumu byl zohledněn vliv koncentrace oxidů dusíku, charakteru proudění vzduchu, vlhkosti vzduchu, intenzity dopadající světla i vlastností stavebních materiálů na účinnost fotokatalytických nátěrů při odstraňování oxidů dusíků ze vzduchu.

Uplatnění: Provedený výzkum poskytuje architektům, projektantům, urbanistům a pracovníkům státní správy možnost, jak vypočítat množství odstraněných oxidů dusíku (NO_x) pomocí 1 m² fotokatalytického nátěru za 1 hodinu, což je základní údaj pro zavedení této technologie do praxe. Zásadní význam má skutečnost, že použitý fotokatalytický nátěr se průmyslově vyrábí v České republice a je snadno komerčně dostupný.

Společné projekty výzkumu a vývoje podpořené z veřejných prostředků:

V roce 2018 byly uděleny tři patenty a jeden užitný vzor.

Patent.

Katalyzátor pro hydroizomerizaci alkanů C4-C7, jeho příprava a použití

Předkládaný vynález se týká katalyzátoru pro katalytický proces hydroizomerizace alkanů C4 až C7 frakce, zejména při výrobě automobilových paliv. Způsob přípravy katalyzátoru pro hydroizomerizace alkanů C4-C7 je vyznačený tím, že zahrnuje následující kroky: i) fluoridace mordenitu vodorozpustným fluoridem nebo kyselinou fluorovodíkovou, ii) následná desilikace mordenitu alkalickým loužením za vzniku modifikovaného mordenitu, iii) iontová výměna atomů sodíku za protony v roztoku obsahujícím H⁺ nebo NH₄⁺ ionty a případnou následnou kalcinací, za tvorby H-formy modifikovaného mordenitu, iv) nanesením alespoň jednoho kovu vybraného ze skupiny sestávající z ruthenia, rhodia, palladia, osmia, iridia a platiny na modifikovaný mordenit v NH₄⁺ nebo H-formě.

Datum udělení patentu: 10. 01. 2018

Původce: Ing. Petr Sazama, Ph.D., Ing. Jaroslava Morávková, Ing. Jana Pastvová, Ing. Dalibor Kaucký, Ph.D.

Využití: Pro katalytický proces hydroizomerizace alkanů C4 až C7 frakce, zejména při výrobě automobilových paliv.

Patent

Způsob výroby katalyzátorů perovskitové struktury, katalyzátory perovskitové struktury a jejich použití pro vysokoteplotní rozklad N₂O

Předkládaný vynález se týká způsobu výroby katalyzátorů perovskitové struktury pro vysokoteplotní rozklad N₂O. Vynález řeší totální eliminaci oxidu dusného na

perovskitových katalyzátorech za vysokých teplot ve směsi plynu, které odpovídá složení pod Pt-Rh sítě při oxidaci amoniaku na NO ve výrobnách kyseliny dusičné. Vynález popisuje syntézní postupy katalyzátorů, jejich charakterizaci a katalytický účinek za podmínek výroby kyseliny dusičné (při teplotách nad 700 °C a průtoku plynu odpovídajícímu GHSV 100 000 h⁻¹). Dále se vynález týká katalyzátorů perovskitové struktury a jejich použití pro vysokoteplotní rozklad N₂O.

Patent zapsán pod číslem CZ307189 (B6)

Datum udělení patentu: 24. 01. 2018

Původce: Ing. Galina Sádovská, Ph.D., Ing. Petr Sazama, Ph.D.

Využití: Vynález řeší totální eliminaci oxidu dusného na perovskitových katalyzátorech za vysokých teplot ve směsi plynu, které odpovídá složení pod Pt-Rh sítě při oxidaci amoniaku na NO ve výrobnách kyseliny dusičné.

Patent

Způsob výroby zeolitu SSZ-13

Postupy syntézy zeolitu SSZ-13 z nových zdrojů Al a Si umožňující řízení distribuce Al ve skeletu

Patent zapsán pod číslem CZ307576(B6)

Datum udělení patentu: 7. 11. 2018

Původce: Kinga Mlekodaj, Veronika Pashkova, Jiří Dědeček, Dr. Ing. Věnceslava Tokarová, Česká republika

Využití: Výroba katalyzátorů pro eliminaci oxidů dusíku z dieselových spalin.

Užitný vzor

Akrylátová nátěrová hmota s fotokatalytickou funkcí

Technické řešení se týká formulace fotokatalyticky aktivní nátěrové hmoty obsahující nanokompozit na bázi nanočástic SiO₂ a TiO₂ se samočisticím a antibakteriálním účinkem, využitelné jako vrchní nátěr pro ochranu různých povrchů.

Patent zapsán pod číslem CZ31688 (U1)

Datum udělení patentu: 10. 04. 2018

Původce: Ing. František Peterka, Ph.D., Ing. Jaroslav Prudil, RNDr. Jaromír Jirkovský, CSc., Ing. Jakub Noll, Mgr. Tereza Sázavská, Ph.D., Ing. Michaela Jakubičková, Ing. Jan Šubrt, CSc., Ing. Eva Plížingrová, Mgr. Monika Palkovská, Mgr. Milan Eliáš, Mgr. Hana Bíbová, Aleš Glončák, Bílovec, Ing. Petr Gala, Ing. Libuše Hochmannová,

Využití: Patent je výsledkem projektu TA ČR s evidenčním čísle TA03010994 a názvem „Výzkum pro výrobu multifunkčního fotoaktivního nanokompozitu k využití ve stavebnictví a nátěrových hmotách“. Průmyslové využití zvažuje společnost „Barvy a laky Teluria, s. r. o.“, která se na řešení projektu spolupodílela a je jedním z vlastníků patentu.

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

Magdaléna Hromadová, PhD. Název organizace: International Society of Electrochemistry Funkce: Officer of Division 6 (Molecular Electrochemistry). Funkční období: 2017-2019

HODNOCENÍ HLAVNÍ ČINNOSTI

RNDr. Jan Hrušák, CSc. Název organizace: Mezinárodní organizace Evropské strategické fórum pro výzkumné infrastruktury (ESFRI) Funkce: Místopředseda, funkční období: 2016-2018.

III.7. Mezinárodní vědecká spolupráce

V rámci mezinárodní spolupráce pracoviště řešilo celkem 6 projektů financovaných Evropskou komisí v rámci programu Horizont 2020. Dále se ústav účastnil ve 13 mezinárodních projektech, které byly řešené v rámci mezinárodní vědecké spolupráce mimo rámcových programů EU a mimo projektů strukturálních fondů.

Projekty financované Evropskou komisí v programu a HORIZONT 2020:

Maximizing the EU shale gas potential by minimizing its environmental footprint (akronym: ShaleXenvironmenT), koordinátor: University College London, UK; řešitel: J. Čejka. Projekt byl zahájen v roce 2015 a pokračuje v řešení do roku 2018.

Graphene-Based Revolution in ICT and Beyond, (akronym GRAPHENE), koordinátor: Chalmers Tekniska Hogskola AB, Sweden, řešitel: L. Kavan. Projekt byl zahájen v roce 2016 a pokračuje v řešení do roku 2018.

Trans-Spin NanoArchitectures: from birth to functionalities in magnetic field (akronym TSuNAMI), Koordinátor: Karlova Univerzita v Praze, řešitel: RNDr. Ing. Kalbáč Martin, Ph. D., Projekt byl zahájen 2017 a pokračuje v řešení do roku 2022

Electrochemical Conversion of Renewable Electricity into Fuels and Chemicals (Akronym: ELCOREL), Koordinátor: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského (Česká republika), řešitel: doc. Ing. Petr Krtíl, CSc. Projekt byl zahájen v roce 2017 a pokračuje v řešení do roku 2021.

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

Towards better Synchronisation of Priority Settings and Evaluation Mechanisms for Research Infrastructures Beyond National Relevance (Akronym: InRoad), Koordinátor: Schweizerischer Nationalfonds Zur Forderung Der Wissenschaftlichen Forschung, řešitel RNDr. Jan Hrušák, CSc., Projekt byl zahájen v roce 2017 a pokračuje v řešení do roku 2018.

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

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

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

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

III.8. Konference a zahraniční hosté

V roce 2018 ústav organizoval či spoluorganizoval **12 konferencí s mezinárodní účastí**, kterých se účastnilo 967 hostů z toho 669 cizinců a **9 konferencí na národní úrovni**, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako **spolupořadatel** s celkovou účastí 465 účastníků.

Konference s mezinárodní účastí:

Visegrad-4/Korea Workshop o bezolovnatých pervskitových solárních článcích s dlouhodobou stabilitou

23. 11. 2018, Místo: Clarion Congress Hotel, Prague, počet účastníků: 10 z toho ze zahraničí: 8

Elektrochemické vlastnosti pokročilých materiálů pro baterie nové generace

5.11 2018, Místo: Ústav Geotechniky SAV v Košicích, počet účastníků: 5 z toho ze zahraničí: 3

Středoevropské symposium teoretické chemie

9.-12. 9 2018 Místo: Hotel Srni, Srni, počet účastníků: 115 z toho ze zahraničí: 100

Gordonovský výzkumný seminář o vodě a vodných roztocích

21. – 22. 7. 2018 Místo: Holderness, New Hampshire, USA, počet účastníků: 69 z toho ze zahraničí: 67

50. symposium katalýzy

5. – 6. 11. 2018, Místo: Praha-ÚFCHJH, počet účastníků: 112 z toho ze zahraničí: 22

51. Heyrovského diskuse

27 – 31.5 2018, Místo: Třešť, počet účastníků: 45 z toho ze zahraničí: 22

38. Moderní Elektrochemické Metody

21-25. 5. 2018, Místo: Jetřichovice, počet účastníků: 82 z toho ze zahraničí: 12

Pokroky v chemii a katalýze zeolitů

21-25.5, 2018, Místo: Český Krumlov, počet účastníků: 106 z toho ze zahraničí: 80

Pokroky ve vesmírné hmotnostní spektrometrii pro hledání mimozemských znaků života

16-18. 5. 2018, Místo: Orleans, France, počet účastníků: 70 z toho ze zahraničí: 67

Setkání konsorcia Ariel

8-10. 5., 2018 Místo: ÚFCHJH, počet účastníků: 100 z toho ze zahraničí: 80

3. Mezinárodní Workshop o disociativním záchytu elektronu

10-13. 4. 2018 Místo: Vila Lanna, Praha, počet účastníků: 78 z toho ze zahraničí: 68

Konference „Kvantová optika v nanoměřítku“ (setkání projektu COST)

12-16. 2., 2018 Místo: ÚFCHJH, počet účastníků: 180 z toho ze zahraničí: 140

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

Heyrovský Memorial Lecture

11. 12. 2018, Místo: Praha, Počet účastníků: 42

Odpoledne s elektrochemií

10. 12. 2018, Místo: Praha, Počet účastníků: 96

Prague membrane Discussions 2018 – Spring Event

8. 3. 2018, Místo: UFCHJH, Počet účastníků: 48

Potlach IV. O vybraných kapitolách z (bio)elektroanalytické chemie

5. 3. 2018, Místo: Olomouc, Počet účastníků: 82

Potlach V. O vybraných kapitolách z organické elektrochemie

10. 10. 2018, Místo: Praha, Počet účastníků: 64

Návštěva a přednáška - Prof. Greg M. Swain: Diamond electrodes

17. 9.-27. 9. 2018 Místo: Praha, Počet účastníků: 28

Workshop "Advances in Low-dimensional Materials"

18-21.9, 2018, Místo: Liblice, Počet účastníků: 65

Za poznáním meziplanetární hmoty a extrasolárních systémů

16. 11. 2018– 18. 11. 2018, Místo: Hvězdárna Valašské Meziříčí, p. o., Počet účastníků: 20

Na hranici země a vesmíru

13. - 14. 10. 2018, Místo: Hvězdárna a radioklub lázeňského města Karlovy Vary, o.p.s., Počet účastníků: 20

Zahraníční hosté ústavu:

V roce 2018 ústav navštívilo **15 zahraničních hostů**; kteří v rámci svého pobytu přednesli své přednášky.

Mezi významnými hosty byl **Prof. Andrea C. Ferrari** University of Cambridge, Velká Británie, který přednesl 28. **Brdičkovu přednášku** na téma "Light Scattering and Emission from Hetero-structures". Další významnou přednášku přednesl profesor **Prof. A. H. Castro Neto** (Director, Centre for Advanced 2D Materials, National University of Singapore) na téma "2D Materials: Science and Technology".



Prof. Andrea C. Ferrari

University of Cambridge, Great Britain



Prof. A.H. Castro Neto

*Director, Centre for Advanced 2D
Materials National University of
Singapore.*

Mezi dalšími významnými hosty byli profesor **Prof. Karl-Heinz Ernst** (Empa, Switzerland, University of Zurich, Switzerland), který přednášel na téma "Chirality in flatland: intermolecular recognition, spin filtering and molecular machines at surfaces" a **Prof. Greg M. Swain** (Michigan State University, Department of Chemistry, USA) který vystoupil na semináři "Advanced Carbon Electrodes for Electroanalysis and Spectroelectrochemistry"

IV. Hodnocení další a jiné činnosti: Ekonomické oddělení

Vedle své hlavní činnosti ústav v roce 2018 pronajímal nebytové prostory v budově areálové jídelny a v hlavní budově následujícím firmám:

PRONÁJEM NEBYTOVÝCH PROSTOR

NÁJEMCE	IČO
HE3DA s.r.o.	28949935
Advanced Materials - JTJ s. r. o.	26763842
Ústav termomechaniky AV ČR, v.v.i.	61388998
FN-NANO s.r.o.	05079233
GODS, s.r.o.	45787956
Dana Kapková Dekolab-sklo	69482292
Ivan Černý	42531772
Lukáš Svoboda	70752648
Zdeňka Beranová	41798473
IVR FS s.r.o.	24277169
LAGET, spol. s r.o.	15030091
M-CATERING	25099671

Kromě toho ústav příležitostně pronajímal své zasedací místnosti vč. techniky. Svým zaměstnancům a zahraničním hostům ústav zajišťoval v případě potřeby ubytování. Další činnost ústav neprováděl.

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

Jediné pochybení závažnější charakteru ÚFCH JH bylo zjištěno pracovníci personálního oddělení u pracovníka ze Slovenska, který chybně při nástupu do pracovního poměru nahlásil, že má zákonné sociální a zdravotní pojištění u českých institucí, ačkoliv měl toto pojištění u slovenských institucí. To bylo oznámeno České správě sociálního zabezpečení a Všeobecné zdravotní pojišťovně. Tyto instituce udělaly kontrolu správnosti odvodu pojistného. V běžně vybíraném zákonném pojistném pochybení nebylo zjištěno. Chybně vybrané pojistné bylo dobropisováno a toto jsme poslali na příslušné slovenské pojišťovny. Slovenská správa sociálního zabezpečení pak za pozdně odvedené pojistné požadovala penále ve výši 79 tis. Kč, které bylo uhrazeno.

Nápravné opatření vzhledem k obecným ustanovením Zákoníku práce, protože tato pokuta je obtížně vymahatelná, nemůžeme stanovit

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

V roce 2018 nenastaly žádné skutečnosti, které by nějakým zvláštním způsobem ovlivnily hospodářské postavení instituce. Výsledky hospodaření umožnily splnit plánovou tvorbu rezervy na opravu nemovitosti v Michli.

VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště

Ústav bude v období 2019-2022 rozvíjet vědeckou a výzkumnou činnost v oblasti fyzikální chemie a relevantních dalších oborů na základě strategie schválené radou ÚFCH JH. Hlavní složkou činnosti bude formulace projektů výzkumu a vývoje a jejich realizace na základě účelového financování formou grantových projektů.

Mezi projekty zahajovanými v roce 2018 je významný zejména ERA chairs projekt **Heyrovský Chair**. Tento projekt pomáhá pozvednout vědecké instituce mezi ty nejlepší na světě. Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského je teprve druhým vědeckým centrem u nás, kterému se podařilo na toto prestižní financování dosáhnout. Celkem tak získal k dispozici necelých 2,5 milionu Eur (přes 60 milionů korun), které využil mimo jiné pro získání světově uznávané vědecké osobnosti na základě mezinárodního výběrového řízení. Pozici obsadil Prof. Stefan Vajda z Argonne National Laboratory and Institute for Molecular Engineering of the University of Chicago. V roce 2019 bude sestaven tým nově zřízeného Oddělení nanokatalýzy.

Heyrovského ústav je teprve druhou institucí v Česku, která projekt ERA Chair získala. Vědecká činnost bude realizována na jednotlivých odděleních ÚFCH JH v oborech biofyzikální chemie, výzkumu nízkodimenzionálních systémů, spektroskopie, struktury a dynamiky v katalýze, molekulární elektrochemie, molekulární katalýzy, elektrochemie v nanoměřítku, elektrochemických materiálů, dynamiky molekul a klastrů, teoretické chemie a chemie iontů v plynné fázi. Důraz bude kladen na mezinárodní excelenci výsledků základního výzkumu publikovaných v respektovaných mezinárodních vědeckých časopisech.

Kromě základního výzkumu budou realizovány navazující projekty aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje ve spolupráci se subjekty z oblasti průmyslu.

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

chartou pro výzkumné pracovníky“ a „Kodexem chování pro přijímání nových pracovníků“. Po dvou letech bude provedeno střednědobé hodnocení, a posléze bude ústav hodnocen každé tři roky.

VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí

Ústav se podílí na výzkumných projektech, které mají vztah k ochraně životního prostředí a to jak v základním výzkumu environmentálně významné fyzikální chemie, tak i v aplikovaném výzkumu ve spolupráci s průmyslem.

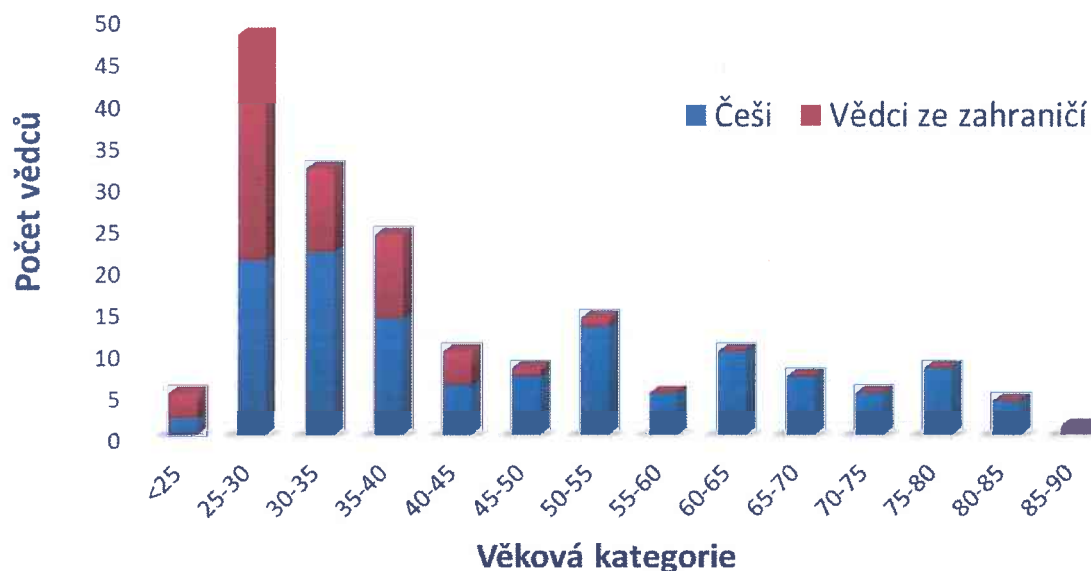
Ústav zajišťuje pravidelnou likvidaci odpadů vzniklých v souvislosti s výzkumnou činností, zejména chemikálií a odepsané kancelářské techniky s využitím služeb specializovaných firem, a to v součinnosti s úřadem městské části. Rovněž třídí vyprodukovaný odpad, konkrétně sklo, papír, plasty, baterie a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

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

Přehled počtu zaměstnanců a rozdělení osobních nákladů jsou uvedeny v Příloze k účetní závěrce. Fyzický stav zaměstnanců k 31. 12. 2018 byl 266, průměrný přepočtený stav za rok 2018 byl 215,6. Zařazení zaměstnanců ústavu do kategorií odborných a vědeckých pracovníků na základě aktualizovaného vnitřního mzdového předpisu a karierního řádu AV ČR, je založeno na hodnocení vědecké práce vedoucími oddělení a atestační komisí na základě konkrétních kritérií.

PŘEHLED POČTU ZAMĚSTNANCŮ K 31.12. 2018

POČET ZAMĚSTNANCŮ CELKEM	266
PRŮMĚRNÝ PŘEPOČETNÝ STAV (NA ÚVAZKY)	215,6
POČET ZAMĚSTNANCŮ (POUZE VĚDECKÉ POZICE)	221
DOKTORANDI	50
POČET ZAHRANIČNÍCH VĚDCŮ (POUZE VĚDECKÉ POZICE)	70 (32%)
POČET ŽEN (POUZE VĚDECKÉ POZICE)	83



Věkové rozložení vědeckých pracovníků ústavu. Zastoupení českých a zahraničních vědců (není přepočítáno na úvazky)

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

V roce 2018 neobdržel ÚFCH JH žádnou žádost o poskytnutí informací dle zákona č. 106/1999 Sb..

Razítko

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

podpis ředitele instituce

ZPRÁVA NEZÁVISLÉHO AUDITORA

**o ověření účetní závěrky za období
od 1. ledna 2018 do 31. prosince 2018**

**veřejné výzkumné instituce Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR,
v.v.i.**

Instituce:

Sídlo:

IČO:

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

Dolejškova 2155/3

182 23 Praha 8

613 88 955

Výrok auditora

Provedl jsem audit přiložené účetní závěrky instituce Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. (dále „Instituce“) sestavené na základě českých účetních předpisů, která se skládá z rozvahy k 31. 12. 2018, výkazu zisku a ztráty, a přílohy v účetní závěrce, která obsahuje popis použitých podstatných účetních metod a další vysvětlující informace. Údaje o Instituci jsou uvedeny v příloze této účetní závěrky.

Podle mého názoru účetní závěrka podává věrný a poctivý obraz aktiv a pasiv instituce Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., k 31. 12. 2018 a nákladů a výnosů a výsledku jejího hospodaření za rok končící 31. 12. 2018 v souladu s českými účetními předpisy.

Základ pro výrok

Audit jsem provedl v souladu se zákonem o auditorech a standardy Komory auditorů České republiky pro audit, kterými jsou mezinárodní standardy pro audit (ISA) případně doplněné a upravené souvisejícími aplikačními doložkami. Moje odpovědnost stanovená těmito předpisy je podrobněji popsána v oddílu Odpovědnost auditora za audit účetní závěrky. V souladu se zákonem o auditorech a Etickým kodexem přijatým Komorou auditorů České republiky jsem na Instituci nezávislý a splnil jsem i další etické povinnosti vyplývající z uvedených předpisů. Domnívám se, že důkazní informace, které jsem shromáždil, poskytují dostatečný a vhodný základ pro vyjádření mého výroku.

Ostatní informace uvedené ve výroční zprávě

Ostatními informacemi jsou v souladu s § 2 písm. b) zákona o auditorech informace uvedené ve výroční zprávě mimo účetní závěrku a moji zprávu auditora. Za ostatní informace odpovídá statutární orgán.

Můj výrok k účetní závěrce se k ostatním informacím nevztahuje. Přesto je však součástí mých povinností souvisejících s auditem účetní závěrky seznámení se s ostatními informacemi a posouzení, zda ostatní informace nejsou ve významném (materiálním) nesouladu s účetní závěrkou či s mými znalostmi o účetní jednotce získanými během provádění auditu nebo zda se jinak tyto informace nejeví jako významně (materiálně) nesprávné. Také posuzuji, zda ostatní informace byly ve všech významných (materiálních) ohledech vypracovány v souladu s příslušnými právními předpisy. Tímto posouzením se rozumí, zda ostatní informace splňují požadavky právních předpisů na formální náležitosti a postup vypracování ostatních informací v kontextu významnosti (materiality), tj. zda případné nedodržení uvedených požadavků by bylo způsobilé ovlivnit úsudek činěný na základě ostatních informací.

Na základě provedených postupů, do míry, již dokáži posoudit, uvádím, že

- ostatní informace, které popisují skutečnosti, jež jsou též předmětem zobrazení v účetní závěrce, jsou ve všech významných (materiálních) ohledech v souladu s účetní závěrkou a
- ostatní informace byly vypracovány v souladu s právními předpisy.

Dále jsem povinen uvést, zda na základě poznatků a povědomí o Instituci, k nimž jsem dospěl při provádění auditu, ostatní informace neobsahují významné (materiální) věcné nesprávnosti. V rámci uvedených postupů jsem v obdržených ostatních informacích žádné významné (materiální) věcné nesprávnosti nezjistil.

Odpovědnost statutárního orgánu

Statutární orgán Instituce odpovídá za sestavení účetní závěrky podávající věrný a poctivý obraz v souladu s českými účetními předpisy a za takový vnitřní kontrolní systém, který považuje za nezbytný pro sestavení účetní závěrky tak, aby neobsahovala významné (materiální) nesprávnosti způsobené podvodem nebo chybou.

Při sestavování účetní závěrky je statutární orgán Instituce povinen posoudit, zda je Instituce schopna nepřetržitě trvat, a pokud je to relevantní, popsat v příloze účetní závěrky záležitosti týkající se jejího nepřetržitého trvání a použití předpokladu nepřetržitého trvání při sestavení účetní závěrky, s výjimkou případů, kdy zřizovatel plánuje zrušení Instituce nebo ukončení její činnosti, resp. kdy nemá jinou reálnou možnost než tak učinit.

Odpovědnost auditora za audit účetní závěrky

Mým cílem je získat přiměřenou jistotu, že účetní závěrka jako celek neobsahuje významnou (materiální) nesprávnost způsobenou podvodem nebo chybou a vydat zprávu auditora obsahující můj výrok. Přiměřená míra jistoty je velká míra jistoty, nicméně není zárukou, že audit provedený v souladu s výše uvedenými předpisy ve všech případech v účetní závěrce odhalí případnou existující významnou (materiální) nesprávnost. Nesprávnosti mohou vznikat v důsledku podvodů nebo chyb a považují se za významné (materiální), pokud lze reálně předpokládat, že by jednotlivě nebo v souhrnu mohly ovlivnit ekonomická rozhodnutí, která uživatelé účetní závěrky na jejím základě přijmou.

Při provádění auditu v souladu s výše uvedenými předpisy je mojí povinností uplatňovat během celého auditu odborný úsudek a zachovávat profesní skepticismus. Dále je mojí povinností:

- Identifikovat a vyhodnotit rizika významné (materiální) nesprávnosti účetní závěrky způsobené podvodem nebo chybou, navrhnout a provést auditorské postupy reagující na tato rizika a získat dostatečné a vhodné důkazní informace, abych jsem na jejich základě mohl vyjádřit výrok. Riziko, že neodhalím významnou (materiální) nesprávnost, k níž došlo v důsledku podvodu, je větší než riziko neodhalení významné (materiální) nesprávnosti způsobené chybou, protože součástí podvodu mohou být tajné dohody (koluze), falšování, úmyslná opomenutí, nepravdivá prohlášení nebo obcházení vnitřních kontrol.
- Seznámit se s vnitřním kontrolním systémem Instituce relevantním pro audit v takovém rozsahu, abych mohl navrhnout auditorské postupy vhodné s ohledem na dané okolnosti, nikoli abych mohl vyjádřit názor na účinnost jejího vnitřního kontrolního systému.
- Posoudit vhodnost použitých účetních pravidel, přiměřenost provedených účetních odhadů a informace, které v této souvislosti statutární orgán Instituce uvedl v příloze účetní závěrky.
- Posoudit vhodnost použití předpokladu nepřetržitého trvání při sestavení účetní závěrky statutárním orgánem a to, zda s ohledem na shromážděné důkazní informace existuje významná (materiální) nejistota vyplývající z událostí nebo podmínek, které mohou významně zpochybnit schopnost Instituce nepřetržitě trvat. Jestliže dojde k závěru, že taková významná (materiální)

nejistota existuje, je mojí povinností upozornit ve své zprávě na informace uvedené v této souvislosti v příloze účetní závěrky, a pokud tyto informace nejsou dostatečné, vyjádřit modifikovaný výrok. Moje závěry týkající se schopnosti Instituce nepřetržitě trvat vycházejí z důkazních informací, které jsem získal do data mojí zprávy. Nicméně budoucí události nebo podmínky mohou vést k tomu, že Instituce ztratí schopnost nepřetržitě trvat.

- Vyhodnotit celkovou prezentaci, členění a obsah účetní závěrky, včetně přílohy, a dále to, zda účetní závěrka zobrazuje podkladové transakce a události způsobem, který vede k věrnému zobrazení.

Mojí povinností je informovat statutární orgán Instituce mimo jiné o plánovaném rozsahu a načasování auditu a o významných zjištěních, která jsem v jeho průběhu učinil, včetně zjištěných významných nedostatků ve vnitřním kontrolním systému.

Audit provedl auditor Ing. Libor Ježek, se sídlem Vranové 1.díl 393, 468 22 Malá Skála , číslo oprávnění Komory auditorů ČR 1769.

Malá Skála dne 3. června 2019



A handwritten signature in blue ink, appearing to be "Ježek", written over a light blue horizontal line.

Přílohy: Rozvaha v plném rozsahu ke dni 31.12.2018

Výkaz zisku a ztrát v plném rozsahu za ke dni 31.12.2018

Příloha v účetní závěrce k 31.12.2018

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

Rozvaha (balance) v plném rozsahu

Název, sídlo, právní forma
a předmět činnosti účetní jednotky

ÚFCH J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.

Praha 8

Dolejškova 2155/3

Praha 8

182 23

Česká republika

Věda a výzkum

ke dni 31.12.2018
(v celých tisících Kč)

IČ
61388955

AKTIVA

AKTIVA		Číslo řádku	Stav k prvnímu dni účet. období	Stav k poslednímu dni účet. období	
A.	Dlouhodobý majetek celkem	Součet ř. 2+10+21+29	1	254 003	271 190
I.	Dlouhodobý nehmotný majetek celkem	Součet ř. 3 až 9	2	899	827
	1. Nehmotné výsledky výzkumu a vývoje		3		
	2. Software		4	899	827
	3. Ocenitelná práva		5		
	4. Drobný dlouhodobý nehmotný majetek		6		
	5. Ostatní dlouhodobý nehmotný majetek		7		
	6. Pořízení dlouhodobého nehmotného majetku		8		
	7. Poskytnuté zálohy na dlouhodobý nehmotný majetek		9		
II.	Dlouhodobý hmotný majetek celkem	Součet ř. 11 až 20	10	700 889	740 535
	1. Pozemky		11	19 662	19 662
	2. Umělecká díla a předměty		12		
	3. Stavby		13	161 873	169 573
	4. Samostatné movité věci a soubory movitých věcí		14	477 318	550 936
	5. Pěstitelské celky trvalých porostů		15		
	6. Základní stádo a tažná zvířata		16		
	7. Drobný dlouhodobý hmotný majetek		17	347	347
	8. Ostatní dlouhodobý hmotný majetek		18		
	9. Pořízení dlouhodobého hmotného majetku		19	29 552	17
	10. Poskytnuté zálohy na dlouhodobý hmotný majetek		20	12 137	
III.	Dlouhodobý finanční majetek celkem	Součet ř. 22 až 28	21		
	1. Podíly v ovládaných a řízených osobách		22		
	2. Podíly v osobách pod podstatným vlivem		23		
	3. Dluhové cenné papíry držené do splatnosti		24		
	4. Půjčky organizačním složkám		25		
	5. Ostatní dlouhodobé půjčky		26		
	6. Ostatní dlouhodobý finanční majetek		27		
	7. Pořizovaný dlouhodobý finanční majetek		28		
IV.	Oprávky k dlouhodobému majetku celkem	Součet ř. 30 až 40	29	-447 785	-470 172
	1. Oprávky k nehmotným výsledkům výzkumu a vývoje		30		
	2. Oprávky k softwaru		31	-621	-679
	3. Oprávky k ocenitelným právům		32		
	4. Oprávky k drobnému dlouhodobému nehmotnému majetku		33		
	5. Oprávky k ostatnímu dlouhodobému nehmotnému majetku		34		
	6. Oprávky ke stavbám		35	-36 075	-39 469
	7. Oprávky k samostatným movitým věcem a souborům movitých věcí		36	-410 742	-429 677
	8. Oprávky k pěstitelským celkům trvalých porostů		37		
	9. Oprávky k základnímu stádu a tažným zvířatům		38		
	10. Oprávky k drobnému dlouhodobému hmotnému majetku		39	-347	-347
	11. Oprávky k ostatnímu dlouhodobému hmotnému majetku		40		



AKTIVA

AKTIVA		Číslo řádku	Stav k prvnímu dni účet. období	Stav k poslednímu dni účet. období	
B.	Krátkodobý majetek celkem	Součet ř. 42+52+72+81	41	104 139	157 834
I.	Zásoby celkem	Součet ř. 43 až 51	42	1 037	1 042
	1. Materiál na skladě		43	1 037	1 021
	2. Materiál na cestě		44		21
	3. Nedokončená výroba		45		
	4. Polotovary vlastní výroby		46		
	5. Výrobky		47		
	6. Zvířata		48		
	7. Zboží na skladě		49		
	8. Zboží na cestě		50		
	9. Poskytnuté zálohy na zásoby		51		
II.	Pohledávky celkem	Součet ř. 53 až 71	52	2 183	1 741
	1. Odeběratelé		53	958	396
	2. Směnky k inkasu		54		
	3. Pohledávky za eskontované cenné papíry		55		
	4. Poskytnuté provozní zálohy		56	304	292
	5. Ostatní pohledávky		57		
	6. Pohledávky za zaměstnanci		58	153	272
	7. Pohledávky za institucemi sociálního zabezpečení a veřejného zdravotního pojištění		59		
	8. Daň z příjmů		60	740	740
	9. Ostatní přímé daně		61		
	10. Daň z přidané hodnoty		62	5	24
	11. Ostatní daně a poplatky		63	19	13
	12. Nároky na dotace a ostatní zúčtování se státním rozpočtem		64		
	13. Nároky na dotace a ost. zúčtování s rozp. orgánů územ. samospráv. celků		65		
	14. Pohledávky za účastníky sdružení		66		
	15. Pohledávky z pevných termínových operací		67		
	16. Pohledávky z vydaných dluhopisů		68		
	17. Jiné pohledávky		69	4	4
	18. Dohadné účty aktivní		70		
	19. Opravná položka k pohledávkám		71		
III.	Krátkodobý finanční majetek celkem	Součet ř. 73 až 80	72	99 344	153 134
	1. Pokladna		73	661	493
	2. Ceniny		74		
	3. Bankovní účty		75	98 683	152 641
	4. Majetkové cenné papíry k obchodování		76		
	5. Dlužné cenné papíry k obchodování		77		
	6. Ostatní cenné papíry		78		
	7. Pořízení krátkodobého finančního majetku		79		
	8. Peníze na cestě		80		
IV.	Jiná aktiva celkem	Součet ř. 82 až 84	81	1 575	1 917
	1. Náklady příštích období		82	1 264	1 798
	2. Příjmy příštích období		83	311	119
	3. Kursové rozdíly aktivní		84		
	AKTIVA CELKEM	Součet ř. 1+42	85	358 142	429 024



PASIVA

		Číslo řádku	Stav k prvnímu dni účet. období	Stav k poslednímu dni účet. období
A.	Vlastní zdroje celkem	Součet ř. 87+91 86	303 668	354 509
I.	Jmění celkem	Součet ř. 88 až 90 87	303 136	354 027
	1. Vlastní jmění	88	245 012	274 335
	2. Fondy	89	58 124	79 692
	3. Oceňovací rozdíly z přecenění majetku a závazků	90		
II.	Výsledek hospodaření celkem	Součet ř. 92 až 94 91	532	482
	1. Účet výsledku hospodaření	92		482
	2. Výsledek hospodaření ve schvalovacím řízení	93		
	3. Nerozdělený zisk, neuhrazená ztráta minulých let	94	532	
B.	Cizí zdroje celkem	Součet ř. 95+98+106+130 95	54 474	74 515
I.	Rezervy celkem	ř. 97 96	26 100	39 100
	1. Rezervy	97	26 100	39 100
II.	Dlouhodobé závazky celkem	Součet ř. 99 až 105 98		
	1. Dlouhodobé bankovní úvěry	99		
	2. Vydané dluhopisy	100		
	3. Závazky z pronájmu	101		
	4. Přijaté dlouhodobé zálohy	102		
	5. Dlouhodobé směnky k úhradě	103		
	6. Dohadné účty pasivní	104		
	7. Ostatní dlouhodobé závazky	105		
III.	Krátkodobé závazky celkem	Součet ř. 107 až 129 106	27 222	35 317
	1. Dodavatelé	107	8 277	1 953
	2. Směnky k úhradě	108		
	3. Přijaté zálohy	109	3 195	14 500
	4. Ostatní závazky	110	141	201
	5. Zaměstnanci	111	6 956	8 285
	6. Ostatní závazky vůči zaměstnancům	112	141	375
	7. Závazky k institucím sociál. zabezp. a veřejného zdravot. pojištění	113	3 952	4 843
	8. Daň z příjmů	114		
	9. Ostatní přímé daně	115	1 342	1 671
	10. Daň z přidané hodnoty	116	662	1 095
	11. Ostatní daně a poplatky	117		
	12. Závazky ze vztahu k státnímu rozpočtu	118	1 436	1 861
	13. Závazky ze vztahu k rozpočtu orgánů územních samosprávních celků	119		
	14. Závazky z upsaných nesplacených cenných papírů a vkladů	120		
	15. Závazky k účastníkům sdružení	121		
	16. Závazky z pevných termínových operací	122		
	17. Jiné závazky	123	153	167
	18. Krátkodobé bankovní úvěry	124		
	19. Eskontní úvěry	125		
	20. Vydané krátkodobé dluhopisy	126		
	21. Vlastní dluhopisy	127		
	22. Dohadné účty pasivní	128	967	366
	23. Ostatní krátkodobé finanční výpomoci	129		
IV.	Jiná pasiva celkem	Součet ř. 131 až 133 130	1 152	98
	1. Výdaje příštích období	131		4
	2. Výnosy příštích období	132	1 152	94
	3. Kursové rozdíly pasivní	133		
	PASIVA CELKEM	Součet ř. 86+95 134	358 142	429 024



Sestaveno dne: 27. 5. 2019

Podpisový záznam: _____

ÚSTAV FYZIKÁLNÍ CHEMIE

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



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

Výkaz zisku a ztráty v plném rozsahu

ke dni 31.12.2018
(v celých tisících Kč)

IČ
61388955

Název, sídlo, právní forma
a předmět činnosti účetní jednotky

ÚFCH J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.
Praha 8
Dolejškova 2155/3
Praha 8
182 23
Česká republika
Věda a výzkum

	Číslo řádku	Činnosti	
		hlavní	hospodářská
A. Náklady	1	302 864	
I. Spotřebované nákupy celkem	2	30 081	
1. Spotřeba materiálu	3	23 296	
2. Spotřeba energie	4	3 479	
3. Spotřeba ostatních neskladovatelných dodávek	5	3 306	
4. Prodané zboží	6		
II. Služby celkem	7	31 295	
5. Opravy a udržování	8	3 599	
6. Cestovné	9	9 034	
7. Náklady na reprezentaci	10	306	
8. Ostatní služby	11	18 356	
III. Osobní náklady celkem	12	161 376	
9. Mzdové náklady	13	116 219	
10. Zákonné sociální pojištění	14	38 671	
11. Ostatní sociální pojištění	15		
12. Zákonné sociální náklady	16	4 098	
13. Ostatní sociální náklady	17	2 388	
IV. Daně a poplatky celkem	18	281	
14. Daň silniční	19	15	
15. Daň z nemovitostí	20	2	
16. Ostatní daně a poplatky	21	264	
V. Ostatní náklady celkem	22	36 352	
17. Smluvní pokuty a úroky z prodlení	23		
18. Ostatní pokuty a penále	24	81	
19. Odpis nedobytné pohledávky	25	7	
20. Úroky	26		
21. Kursové ztráty	27	104	
22. Dary	28		
23. Manka a škody	29		
24. Jiné ostatní náklady	30	36 160	
VI. Odpisy, prodaný majetek, tvorba rezerv a opravných položek celkem	31	43 479	
25. Odpisy dlouhodobého nehmotného a hmotného majetku	32	30 479	
26. Zůstatková cena prodaného dlouhodobého nehmot. a hmot. majetku	33		
27. Prodané cenné papíry a podíly	34		
28. Prodaný materiál	35		
29. Tvorba rezerv	36	13 000	
30. Tvorba opravných položek	37		
VII. Poskytnuté příspěvky celkem	38		
31. Poskytnuté příspěvky zúčtované mezi organizačními složkami	39		
32. Poskytnuté členské příspěvky	40		
VIII. Daně z příjmů celkem	41		
33. Dodatečné odvody daně z příjmů	42		
Náklady celkem	43	302 864	



	Číslo řádku	Činnosti	
		hlavní	hospodářská
B. Výnosy	44	303 346	
I. Tržby za vlastní výkony a za zboží celkem	45	9 402	
1. Tržby za vlastní výrobky	46		
2. Tržby z prodeje služeb	47	9 402	
3. Tržby za prodané zboží	48		
II. Změny stavu vnitroorganizačních zásob celkem	49		
4. Změna stavu zásob nedokončené výroby	50		
5. Změna stavu zásob polotovarů	51		
6. Změna stavu zásob výrobků	52		
7. Změna stavu zvířat	53		
III. Aktivace celkem	54		
8. Aktivace materiálu a zboží	55		
9. Aktivace vnitroorganizačních služeb	56		
10. Aktivace dlouhodobého nehmotného majetku	57		
11. Aktivace dlouhodobého hmotného majetku	58		
IV. Ostatní výnosy celkem	59	74 688	
12. Smluvní pokuty a úroky z prodlení	60		
13. Ostatní pokuty a penále	61		
14. Platby za odepsané pohledávky	62		
15. Úroky	63	14	
16. Kursové zisky	64	393	
17. Zúčtování fondů	65	16 973	
18. Jiné ostatní výnosy	66	57 308	
V. Tržby z prodeje majetku, zúčtování rezerv a opravných položek celkem	67		
19. Tržby z prodeje dlouhodobého nehmotného a hmotného majetku	68		
20. Tržby z prodeje cenných papírů a podílů	69		
21. Tržby z prodeje materiálu	70		
22. Výnosy z krátkodobého finančního majetku	71		
23. Zúčtování rezerv	72		
24. Výnosy z dlouhodobého finančního majetku	73		
25. Zúčtování opravných položek	74		
VI. Přijaté příspěvky celkem	75		
26. Přijaté příspěvky zúčtované mezi organizačními složkami	76		
27. Přijaté příspěvky (dary)	77		
28. Přijaté členské příspěvky	78		
VII. Provozní dotace celkem	79	219 256	
29. Provozní dotace	80	219 256	
Výnosy celkem	81	303 346	
C. Výsledek hospodaření před zdaněním	82	482	
34. Daň z příjmů	83		
D. Výsledek hospodaření po zdanění	84	482	

Sestaveno dne: 27.5.2019

Podpisový záznam:

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





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

Dolejškova 3, 182 23 Praha 8

Telefon: 28658 3014, 26605 2011

Fax: 28658 2307, e-mail: director@jh-inst.cas.cz

IČO: 61388955, DIČ: 61388955

Příloha k účetní závěrce k 31. 12. 2018
za účetní období roku 2018, tj. 1.1. až 31.12.2018

Účetní jednotka: **Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.**
Sídlo: Dolejškova 3, 182 23 Praha 8
IČ: **61388955**
Právní forma: Veřejná výzkumná instituce (v.v.i.)
Zápis: V rejstříku veřejných výzkumných institucí vedených MŠMT ČR ze dne 3.7. 2006 pod spis. zn. 17 113/2006-34/ÚFCH JH
Zřizovatel: Akademie věd České republiky – organizační složka státu, Národní 1009/3, 11720 Praha 1, IČ: 60165171
Statutární orgán: **Prof. Dr. Martin Hof, Dr. rer. nat. DSc.**, ředitel
Prof. RNDr. Patrik Španěl Dr. rer. nat., *zást. řed. pro vědu*
Doc. Mgr. Michal Fárník Ph. D. DSc. *zást. řed. pro vzdělávání*
RNDr. Ing. Martin Kalbáč Ph.D. *zást. řed. pro ekonomiku a správu*

Další orgány: Dozorčí rada ve složení
Ing. Petr Bobák CSc. – předseda (AV ČR)
RNDr. Jan Hrušák, CSc. – místopředseda (ÚFCH JH)
Ing. Zbyněk Černý, CSc. – člen (ÚACH)
Doc. Mgr. Iva Matolínová, DSc. – člen (MFF UK)
doc. Ing. Jiří Homola, DSc. – člen (ÚFE)

Rada instituce (interní členové)
Prof. RNDr., Patrik Španěl Dr. rer. nat. – předseda
Prof. RNDr. Kavan Ladislav, CSc., DSc. – místopředseda
Mgr. Jiří Dědeček, CSc., DSc. – člen
Prof. Dr. Martin Hof, Dr. rer. nat. DSc. – člen
Mgr. Michal Horáček, Ph. D. – člen
Mgr. Magdaléna Hromadová, Ph. D. – člen
RNDr. Ing. Martin Kalbáč Ph.D. – člen
Doc. Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat. DSc. – člen
Prof. RNDr. Zdeněk Samec, DrSc. – člen

Rozvahový den: **31.12. 2018**
Okamžik sestavení účetní závěrky: 27. 05. 2019

V roce 2018 podle zákona (č. 341/2005 Sb. o v.v.i.) pokračovalo funkční období všem orgánům ÚFCH JH, zvolených r. 2017, včetně statutárního orgánu beze změn. Nejvyšším orgánem ze zákona je „**Dozorčí rada**“, jediným **statutárním zástupcem je ředitel**, který jako jediný ze zákona zastupuje ÚFCH JH se všemi právy a povinnostmi. Dalším voleným orgánem je „**Rada instituce**“, jejíž práva a povinnosti jsou rovněž určeny zákonem č. 341/2005 Sb.

Předmětem hlavní činnosti **Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. (ÚFCH JH)** je vědecký výzkum ve fyzikální chemii, elektrochemii, analytické chemii a chemické fyzice.

Spolu s hlavní činností ústav přispívá ke zvyšování úrovně poznání a vzdělanosti a k využití výsledků vědeckého výzkumu v praxi. Například poskytuje vědecké posudky, provádí konzultační a poradenskou činnost, ve spolupráci s vysokými školami uskutečňuje doktorské studijní programy a vychovává vědecké pracovníky, rozvíjí mezinárodní spolupráci, organizuje konference, semináře a přednášky.



V rámci hlavní činnosti ústav zajišťuje infrastrukturu výzkumu, včetně poskytování ubytování svým zaměstnancům a hostům. Dále zajišťuje i komerční činnost ve vědě a výzkumu, kde provádí takové činnosti, které nelze běžně provádět, či zajišťovat prostřednictvím komerčních firem, jako jsou např. různá měření a testy. Též zajišťuje pořádání vědeckých seminářů a konferencí. Z komerčních „nevědeckých“ činností pronajímá volné prostory v nemovitostech, hlavně jako ubytovací kapacitu pro vědce a minimální část k běžným komerčním účelům. V tomto účetním období ÚFCH JH nezajišťoval stravování pracovníků areálu z důvodu kompletní rekonstrukce budovy. Část příjmů je zajištěna i výnosem z úroků na běžném účtu. Tyto úroky se staly však v letošním roce bezvýznamné.

Podle výše uvedeného účetní jednotka vykonává činnosti, které jsou plně v souladu s § 21 zákona č. 341/2005 Sb. v platném znění. Jiné nevědecké činnosti, které jsou ryze komerčního charakteru, jsou vykonávány v omezené míře a zisk z těchto činností slouží výlučně jako příspěvek na hlavní činnost, popřípadě ke krytí režijních nákladů, nebo jsou z něj financovány ty vědecké činnosti nebo podpory vědy a výzkumu, které s ohledem na zákon č. 130/2002 Sb. nemohou být financovány z institucionálních prostředků nebo grantů.

ÚFCH JH nemá podíly v žádných obchodních společnostech a nemá žádné jiné vklady v jiných organizacích nepodnikatelského typu. Rovněž tak není ovládacím subjektem v jiných organizacích a není ovládána jinou osobou s výjimkou svého zřizovatele, jehož práva a povinnosti jsou jednoznačně stanoveny v příslušných ustanovení v zákona č. 341/2005 Sb. (viz. např. §15).

Právní úprava a informační systém

ÚFCH JH AV ČR, v.v.i. podle § 29 Zákona č. 341/2005 Sb. o veřejných výzkumných institucích v platném znění vede účetnictví podle Zákona č. 563/1991 Sb. o účetnictví v platném znění a vyhlášky Ministerstva financí č. 504/2002 Sb. ze dne 6. listopadu 2002, kterou se provádějí některá ustanovení Zákona č. 563/1991 Sb., o účetnictví, ve znění pozdějších předpisů, pro účetní jednotky, u kterých hlavním předmětem činnosti není podnikání, pokud účtují v soustavě podvojného účetnictví.

Zpracování účetnictví je zajištěno účetním systémem HELIOS ORANGE firmy ASSECO SOLUTIONS. Systém HELIOS ORANGE je modulární systém ekonomických agend, určený pro všechny typy organizací, tedy i pro nevýdělečné. Na tento systém přešla organizace od 1.1. 2009 a v novém systému je zpracovávána kompletní ekonomická administrativa instituce.

Účtový rozvrh roku 2018 navazuje na účetní rozvrh roku 2017 a je zpracován v souladu se závazným členěním účtové osnovy, vyplývající z obecně platných předpisů (viz. vyhl. č. 504/2002 Sb. v platném znění) a potřeb zřizovatele až na úroveň syntetických a analytických účtů.

Vnitropodnikové (interní) účtování v účetní jednotce je, stejně jako v předchozích účetních obdobích, jak zakázkové (granty, úkoly), tak střediskové, ale hlavně dle typu financování, „institucionální“ (int. ozn. TA100), „grantové“ (int. ozn. TA120), „vlastní“ (int. ozn. TA220). Na institucionálním okruhu jsou zachyceny příjmy, pouze dotace od AV ČR (provozni) a všechny provozní výdaje, které jsou spjaté s chodem ÚFCH JH. Na „vlastním okruhu“ financování jsou zachyceny veškeré příjmy, s výjimkou institucionální dotace a grantových dotací. Na tomto okruhu jsou zachycovány náklady, které se přímo vážou, resp. lze přímo přiřadit na tržby s nimi souvisejícími. Na „grantovém“ okruhu jsou účtovány všechny operace související s přidělenými granty, tj. to, co je financováno jinými subjekty než je AVČR (např. GAČR, TAČR, ministerstva, EU apod.) nebo vlastními zdroji.

Některé dotace na TA120 mají v podmínkách spolufinancování. Spolufinancování probíhá buďto z institucionálních prostředků (TA100) nebo pokud toto není možné, buďto z obecně závazných předpisů nebo podmínek grantu, tak z vlastních prostředků na vědu a výzkum (TA220). Vždy je však stejné č. zakázky, grantu nebo úkolu.

Vzhledem k tomu, že i v tomto účetním období výdaje v institucionálním okruhu byly vyšší než dotace od AV ČR, skončilo hospodaření ztrátou. Naopak hospodaření na okruhu TA 220 je přebytkové a to z toho důvodu, že na tomto okruhu do výnosů jsou účtovány, podle předem stanovených podmínek grantovou agenturou, tzv. „overheady“, což je příspěvek z grantových projektů na režii. Z tohoto přebytku, který je k tomuto účelu určen, se pak pokrývá ztrátové hospodaření na TA 100. Tato kompenzace je v souladu s předpisy, protože ÚFCH JH, je v.v.i., nikoliv rozpočtovou organizací, kde je kompenzace zakázána.



ÚFCH JH účtuje o zásobách materiálu způsobem „A“, výdej zásob ze skladu je účtován cenami zjištěnými aritmetickým průměrem. O zásobách pohonných hmot, které jsou z hlediska organizace bezvýznamné, se účtuje způsobem „B“. Účtování o laboratorních plynech je rovněž způsobem „B“, protože zůstatek plynu v tlakové láhvi nelze objektivně zjistit a z hlediska celkového obrátu se jedná o marginální položku. Celkové zásoby tvoří z hlediska účetní jednotky jako celku nevýznamnou položku.

Způsoby oceňování:

Účetní jednotka oceňuje majetek, pohledávky a závazky standardním způsobem a to v souladu se zákonem č. 563/1991 Sb. o účetnictví a na tento zákon navazující vyhláškou č. 504/2002 Sb.

- hmotný a nehmotný dlouhodobý majetek je oceněn pořizovací cenou
- zásoby materiálu jsou účtovány způsobem „A“ a v inventuře byly oceněny průměrnými cenami
- zásoby vlastní výroby v r. 2018 nebyly
- zásoby v nevýznamné míře, např. zůstatek PHM v nádržích vozidel, sledovány nejsou
- peníze jsou oceněny jmenovitými hodnotami
- pohledávky a závazky jsou oceněny jmenovitými hodnotami

Majetek

Metodika účtování majetku zůstává stejná jako v minulých účetních obdobích. Sledování majetku s vyšší cenou než 5 tis. Kč a delší životností než 1 rok, je v modulu „Majetek“ na jednotlivých inventárních kartách.

Drobný majetek je účtován přímo do nákladů a je evidován v majetkové evidenci podle osob a útvarů. Pokud to vyžaduje jiný smluvní dokument, např. grantová smlouva, dotace apod., je evidován i na příslušný grant, resp. dotaci.

Dlouhodobý majetek je evidován v souladu s vyhláškou č. 504/2002 Sb. na majetkových účtech a odepisuje se prostřednictvím účetních odpisů rovnoměrně do výše ceny, ve které je majetek oceněn v účetnictví, podle odpisového plánu. Daňově majetek není odepisován.

Odpisové sazby, použité v účetnictví, se oproti roku 2017 nezměnily. (pozn. účetní odpisy nejsou daňově účinné):

Název a interní označení (dle číselníku majetku)	Odpisová sazba % r. 2018	Odpisová sazba % r. 2017
Budovy - stavby, sk. H1, H2	2,00	2,00
Energ. stroje, sk. H3	10,00	10,00
Pracovní stroje, sk. H4	20,00	20,00
Přístroje, sk. H5 bez rychleji odepisovaných	20,00	20,00
Přístroje z grantů, sk. H5 - odepisované 4 roky	25,00	25,00
Přístroje z grantů, sk. H5 - odepisované 6 let	16,67	16,67
Výpočetní technika, sk. PC	33,30	33,30
Dopravní prostředky, sk. H6	20,00	20,00
Inventář, sk. H7 -	10,00	10,00
Nehmotný investiční majetek, sk. PG	20,00	20,00

Účetní odpisy ve výši 30.479.040,59 Kč jsou nákladovou položkou, avšak daňově neúčinnou. Na druhé straně k těmto odpisům je zúčtováno finanční krytí, které je také daňově neúčinným výnosem (viz § 18a zákona č. 586/1992 Sb.).



Další informace

Kurzy

Aktiva a závazky v cizí měně na účtech účtových skupin 21-Peníze, 22-Účty v bankách a na účtech pohledávek a závazků byla k rozvahovému dni přepočtena aktuálními směnnými kurzy vyhlášenými ČNB k 31. 12. 2018:

1 EUR	25.725 CZK
1 USD	22,466 CZK

V průběhu roku ÚFCH JH, jako účetní jednotka, používala k oceňování účetních operací v cizí měně v souladu s § 24 Zákona o účetnictví pevný kurz, který činil:

1 EUR	25.540 CZK
1 USD	21,291 CZK

Pohledávky

Problematika nedobytných pohledávek je pod hladinou významnosti. Odepsány jsou pouze ty pohledávky, u kterých by náklady na vymáhání a zejména pracnost převýšily vymoženou částku. V roce 2018 jsme odepsali následující pohledávky.

Odpis pohledávky za obědy od zaměstnanců, kteří ukončili pracovní poměr a pohledávka za nimi byla zjištěna díky tomu, že vyúčtování obědů je až následující měsíc, kdy pracovník není již ve stavu. V tomto případě je problém pouze s pracovníky ze zahraničí. Výše této odepsané pohledávky za r. 2014 a 2015 činí 2.261,- Kč.

Dále byla odepsána pohledávka za daň z prodeje nemovitosti ve výši 5.016 Kč.

Závazky jsou průběžně hrazeny a účetní jednotka nemá žádné neuhrazené závazky po lhůtě splatnosti.

Jiné

ÚFCH JH, jako nezisková organizace, je příjemce dotací jak ze státního rozpočtu (od AV ČR, MŠMT, MPO apod.), tak i od jiných subjektů (např. od EU). Protože s těmito prostředky musí hospodařit tak, jak jí ukládá smlouva nebo jiný závazný dokument o hospodaření s těmito prostředky, upřednostňuje zaúčtování výdajů dle těchto dokumentů a to s přihlédnutím k ustanovení § 8 odst. 3 Zákona č. 280/2009 Sb. (Daňový řád) a § 24 odst. 2 písm. zc Zákona č. 586/1992 Sb. o daních z příjmů. Kontrolu vyúčtování těchto prostředků provádí poskytovatel a to buď přímo, tj. interním kontrolním orgánem, nebo prostřednictvím pověřené osoby, obvykle auditorem. Rovněž tak při účtování jednotlivých položek do výdajů (účetních nákladových skupin) jsou upřednostňovány požadavky poskytovatele před obecnými předpisy (např. vyhl. č. 504/2002 Sb.). V případě nedodržení pokynů poskytovatele je nebezpečí, že by (i z formálních důvodů) výdaj neuznal a ÚFCH JH by musel dotaci vracet v plné výši.

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

Zaměstnanci

Přehled počtu zaměstnanců ÚFCH JH k 31. 12. 2018:

1. ve fyz. osobách	266
2. přepočtený stav	216

Počet a postavení zaměstnanců, kteří jsou zároveň členy statutárních, kontrolních nebo jiných orgánů ústavu:

Tato informace je v plném rozsahu uvedena v záhlaví této přílohy

Činnosti řídicích orgánů ÚFCH JH, definovaných zákonem č. 341/2005 Sb. o v.v.i., byla v roce 2018 vyplacena odměna v celkové výši 292.600,- Kč. Žádné další funkční požitky z titulu jejich funkce vypláceny nebyly.



Příděl do sociálního fondu z mezd, který je pro v.v.i. **povinný ze zákona č. 341/2005 Sb. (§ 27 odst.1) ve výši 2%** činil 2.288 tis. Kč, což je oproti r. 2017 mírný nárůst, ten však souvisí s nárůstem mezd. Tento příděl je povinný podle § 27 odst. 1 zák. č.341/2005 Sb. o v.v.i.

V roce 2018 účetní jednotka tvořila FÚUP v celkové výši 6.193, z institucionálních prostředků to bylo ve výši 4.454 tis. Kč a grantových prostředků to bylo ve výši 1.739 tis. Kč.

V roce 2019 mezi rozvahovým dnem a okamžikem sestavení účetní závěrky nenastaly žádné významné události, které by měly vliv na účetní závěrku r. 2018 nebo zásadním způsobem ovlivnily ekonomické ukazatele účetní jednotky.

Rezervy

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

Plánovaná tvorba rezervy v tomto období je 50 mil Kč a celková výše rezervy je 13 mil. Kč. Celková výše rezerv na opravu hmotného majetku, nemovitosti v Michli, je k 31.12. celkem 39.100 tis. Kč.

Ostatní

Účetní jednotka využívá ustanovení § 20 odst.7 zákona č. 586/1992 Sb. o DZP. Toto daňové zvýhodnění užívá pouze pro svoji hlavní činnost a mj. i za tímto účelem vede střediskové účtování podle typu financování (viz úvod). Toto financování, úsporou za daňové povinnosti, je přednostně využíváno v následujícím roce na hrazení běžných výdajů ÚFCH JH. Vzhledem k aktuálnímu principu účetnictví, kdy jsou odděleny předpisy plateb od vlastního financování, nelze toto financování z účetnictví prokázat. Použití daňového zvýhodnění je patrné z toho, že instituce používá veškeré finanční prostředky pouze na vědu a výzkum a režii s touto činností přímo spjatou.

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

Datum sestavení: 27.5. 2019 ;	Sestavil: Ing. Ivo Friedjung  Podpis a jméno	Statutární zástupce: prof. Prof. Dr. Martin Hof, Dr. Rer. nat. DSc  ÚSTAV FYZIKÁLNÍ CHEMIE J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. 182/23 Praha 8, Dolejškova 3 IČO: 61388955, DIČ: CZ61388955 Podpis a jméno
----------------------------------	---	---



