

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

IČ: 61388980

Sídlo: Husinec-Řež

Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2023

Radou pracoviště projednána dne: 23. 5. 2024

Dozorčí radou pracoviště schválena dne: 10. 6. 2024

V Řeži dne 19. 3. 2024

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

a) Výchozí složení orgánů pracoviště

Ředitel pracoviště: **Ing. Kamil Lang, CSc., DSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.**

Jeho první funkční období bylo do 30. 7. 2023. Ve výběrovém řízení bylo potvrzeno jeho druhé funkční období 1. 8. 2023 – 31. 7. 2028.

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

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

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

členové:

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

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

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

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

Mgr. Jan Hynek, Ph.D., ÚACH AV ČR, v. v. i. od 16. 5. 2023

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

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

RNDr. Jan Nekvinda, Ph.D., ÚACH AV ČR, v. v. i. do 31. 3. 2023

RNDr. Jiří Plocek, Ph.D., ÚACH AV ČR, v. v. i.

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

prof. Dr. Ing. David Sedmidubský, VŠCHT Praha

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

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

místopředseda: RNDr. Bohumír Grüner, CSc.

členové:

Ing. Petr Bobák, CSc., ÚŽFG AV ČR, v. v. i. do 8. 2. 2023

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

Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, VŠCHT Praha

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

b) Změny ve složení orgánů:

RNDr. Jan Nekvinda, Ph.D. rezignoval na členství v Radě ústavu a novým interním členem byl zvolen Mgr. Jan Hynek, Ph.D. s účinností od 16. 5. 2023 s mandátem do 15. 5. 2028. Ing. Petr Bobák, CSc. rezignoval na členství v Dozorčí radě ústavu. Akademická rada na svém 20. zasedání 7. 2. 2023 jmenovala Ing. Jiřího Pleška, CSc. členem Dozorčí rady ústavu s účinností od 8. 2. 2023 na první pětileté funkční období do 8. 2. 2028.

c) Informace o činnosti orgánů:

Ředitel:

V r. 2023 byly zajišťovány především následující agendy:

- plnění výzkumných úkolů a postupů řešení grantových projektů včetně prezenčních kontrol aktivit a personálního zabezpečení v jednotlivých odděleních a laboratořích,
- kontrola naplňování koncepce výzkumné činnosti Ústavu pro roky 2023-2027
- řádné vedení účetnictví,
- výběrová přijímací řízení vysokoškolsky vzdělaných pracovníků,
- periodická činnost a kontrola na úseku bezpečnosti práce, prevence rizik a ochrany zdraví při práci,
- účast na zasedáních Rady ústavu a zasedání Dozorčí rady,
- dohled nad implementací Plánu genderové rovnosti.

V průběhu r. 2023 byly vydány čtyři interní předpisy (IP): IP č. 120 – Atestační komise, IP č. 121 – Mzdový předpis, IP č. 122 – Vnitřní oznamovací systém a IP č. 123 - Volební řád. Byl vydán Příkaz ředitele k provedení inventarizace hospodářských prostředků v r. 2023. Dále byla vydána Směrnice ředitele pro účely poskytování cestovních náhrad v roce 2023 a Metodika vykazování skutečných nepřímých nákladů projektů výzkumu a vývoje v r. 2023.

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

Přístrojové vybavení ústavu bylo v r. 2023 doplněno o modul pro měření rentgenem buzené luminiscence pro stávající luminiscenční spektrometr FLS1000-DD-stm/Edinburgh Instruments (cena 2116 tis. Kč). V součinnosti s Technickou komisí a s přihlédnutím k požadavkům jednotlivých oddělení a laboratoří byl vypracován plán nákladných oprav a akvizicí přístrojového vybavení pro další období.

V r. 2023 bylo řešeno 17 projektů VaV v programech GA ČR (11), TA ČR (2), MŠMT (1), Horizont 2020 (3) a další projekty byly podporovány zřizovatelem (např. Strategie AV 21, Mobility plus). Účelové prostředky plynoucí z podpory zmíněných poskytovatelů do rozpočtu představovaly cca 32 % neinvestičních nákladů ústavu. Mzdové prostředky vyplacené z účelových dotací činily cca 22 %.

Rada pracoviště:

V r. 2023 se uskutečnilo deset jednání Rady ÚACH AV ČR v. v. i.:

130. jednání, 1. 2. – 3. 2. 2023, *per rollam*

- Rada projednala a schválila navržené složení výběrové komise pro výběrové řízení pro obsazení funkce ředitele/ky Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i. pro období 1. 8. 2023 – 31. 7. 2028.

131. jednání, 21. 2. – 23. 2. 2023, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila návrh K. Škocha na udělení prémie Lumina Queruntur.

132. jednání, 15. 3. – 17. 3. 2023, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhu na udělení Prémie Otto Wichterleho Janu Hynkovi a návrhu na zařazení Silviy Garrappy do Programu podpory perspektivních lidských zdrojů.

133. jednání, 23. 3. - 27. 3. 2023, *per rollam*

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

134. jednání, 18. 4. - 21. 4. 2023, *per rollam*

- Rada odsouhlasila úpravu IP 107 – Volební řád ÚACH ve znění dodatku č. 2.

135. jednání, 9. 5. - 10. 5. 2023, *per rollam*

- Rada projednala a s připomínkami doporučila podání návrhů dvou projektů Gurua Karthikeyan Thirunavukkarasu do grantové soutěže MŠMT.

136. jednání, 24. 5. 2023

- Podle pravidel pro obsazování funkce ředitelů pracovišť AV ČR (směrnice Akademické rady č. 4/2022) Rada projednala doporučení výběrové komise a vyslechla představy kandidáta Kamila Langa o směřování ústavu v příštím období. Bylo provedeno tajné hlasování s výsledkem 11/12 pro a 1/12 se zdržel, na jehož základě Rada připravila návrh pro předsedkyni AV ČR na jmenování K. Langa ředitelem ústavu pro nadcházející pětileté období.

137. jednání, 20. 6. 2023

- Rada projednala a schválila Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ústavu za r. 2022, seznámila se se zprávou auditora o ověření účetní závěrky za r. 2022, projednala a schválila rozpočet výnosů a nákladů na r. 2023 a střednědobý výhled 2024-2025. Rada dále schválila přesun celého hospodářského výsledku za r. 2022 do Rezervního fondu.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu Kaplana Kirakciho do grantové soutěže MŠMT.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu Petry Ecordchard do grantové soutěže MŠMT/OP JAK/Výzkumné infrastruktury.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu Tomáše Bašeho do grantové soutěže MŠMT /InterAction.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu Marcela Ehna do grantové soutěže MŠMT.

138. jednání, 8. 9. – 11. 9., *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhů projektů Petry Ecordchard a Moniky Motlové do grantové soutěže TA ČR/Prostředí pro život.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu Moniky Motlové do programu AV ČR/Mobility Plus.

139. jednání, 16. 11. – 20. 11. 2023, *per rollam*

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu Zbyňka Černého do grantové soutěže TA ČR/TREND Nováči.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu Bohumíra Grünera do grantové soutěže GA ČR.
- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu Jiřího Henycha do soutěže Evropské komise HORIZON-CL3-2023 Disaster-Resilient Society.

140. jednání, 11. prosince 2023

- Rada projednala a doporučila podání návrhu projektu Jiřího Henycha do grantové soutěže NATO Science for Peace Multi-years Projects.
- Rada vyslechla informaci o podnětu rektorky AVU k ukončení činnosti společného pracoviště ALMA a ukončení spolupráce na projektu GA ČR (2022-2024). Ústav žádá vedení GA ČR o převedení celého projektu do jeho kompetence beze změny věcné náplně.
- Rada projednala a schválila návrh interního předpisu (IP) č. 123, Volebního řádu pro volby v Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i., který nahradí dosavadní IP č. 107.
- Rada projednala IP č. 122 Vnitřní oznamovací systém a vzala na vědomí jmenování Příslušné osoby.
- Rada projednala a schválila návrh IP č. 121, Mzdového předpisu, který nahradí dosavadní IP č. 104.
- Rada projednala a schválila návrh nového složení Atestační komise a diskutovala o kritériích, podle kterých jsou pracovníci hodnoceni.
- Rada vyslechla informaci ředitele o metodice hodnocení výsledků vědecké práce ústavů AV ČR za období 2020–2024.

Dozorčí rada:

V r. 2023 se uskutečnily dvě jednání Dozorčí rady ÚACH AV ČR v. v. i.

24. jednání, 9. 6. 2023

Dozorčí rada

- projednala návrh rozpočtu nákladů a výnosů na rok 2023 a střednědobý výhled 2024-2025,
- vzala na vědomí Výroční zprávu o činnosti a hospodaření ÚACH AV ČR, v. v. i. v r. 2022 bez připomínek,
- vzala na vědomí zprávu nezávislého auditora o ověření účetní závěrky za r. 2022 bez připomínek,
- určila firmu ACONTIP s.r.o. (IČ 01709585) auditorem na rok 2023,
- vzala na vědomí přehled právních jednání nad 50 tis. Kč,
- udělila předchozí písemný souhlas k nájemní smlouvě s AVU uzavřenou 12. 6. 2023,
- udělila předchozí písemný souhlas k udělení dvou podlicencí firmě Betonext Production s.r.o., IČ 19295537,

- akceptovala zprávu o činnosti DR za r. 2022,
- zhodnotila manažerské schopnosti ředitele ÚACH Ing. Kamila Langa, CSc., DSc.

25. jednání, 29. 11. 2023

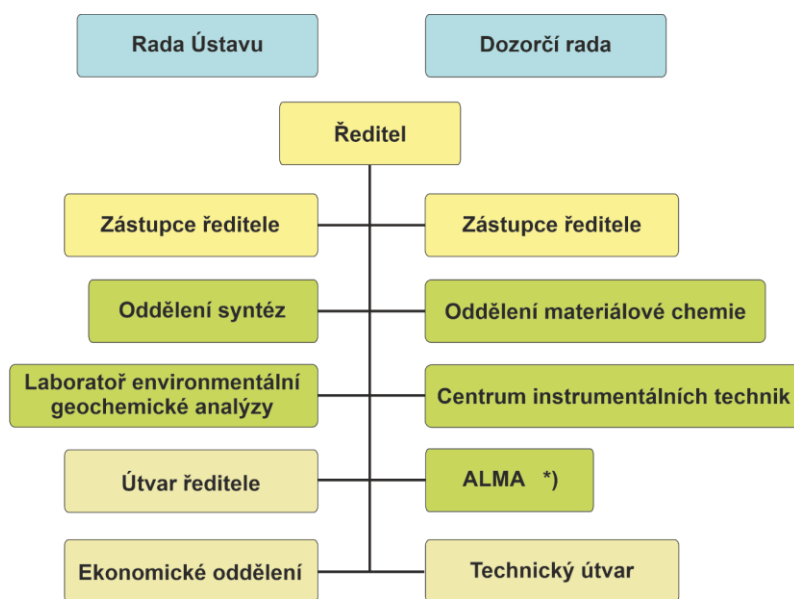
Dozorčí rada

- vyslechla zprávu o hospodaření ÚACH v r. 2023 a finančním plánu na r. 2024,
- se seznámila se změnami na ústavu souvisejícími s ukončením spolupráce s AVU a ukončením pronájmu laboratoří ÚJF AV ČR, v. v. i.

II. Informace o změnách zřizovací listiny:

V r. 2023 nedošlo ke změně zřizovací listiny.

Organizační řád



*) Akademická laboratoř materiálového průzkumu malířských děl (ALMA),
společné pracoviště Akademie výtvarných umění v Praze a Ústavu anorganické chemie AV ČR, v.v.i.

III. Hodnocení hlavní činnosti:

1. Vědecká činnost ústavu a uplatnění jejích výsledků

1a) Stručná charakteristika vědecké činnosti

V roce 2023 byla výzkumná činnost ústavu zaměřena na následující oblasti:

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

Chemie boru

Předmětem studia byly zejména:

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

Fotoaktivní anorganické molekuly a materiály

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

- Klastry přechodných kovů
- Porfyrinové sloučeniny
- Fotokatalytické materiály

Pokročilé sorpční materiály pro životní prostředí

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

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

Ochrana kulturního dědictví

Příspěvkem ke snaze o zachování kulturního dědictví je interdisciplinární výzkum výtvarného umění využívající poznatků moderní anorganické a analytické chemie. Tento výzkum má silný aplikační potenciál v oblasti:

- Provenienční analýzy
- Studia degradačních procesů

Environmentální geochemie

Hlavní pozornost je věnována výzkumu:

- Kontaminovaných naplavenin a nádrží
- Antropogenních a přírodních geochemických anomálií

Aplikovaný výzkum

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

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

1b) Výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti a jejich aplikací

Nejvýznamnější výsledky byly v r. 2023 získány především v oblastech materiálové chemie a chemie boranových sloučenin:

Vývoj nových fotoaktivních oktaedrických klastrových komplexů molybdenu (Mo_6), které byly použity samostatně nebo asociovány s biokompatibilními polymery. Zmíněné nanočástice byly využity pro fotodynamickou terapii (PDT), antimikrobiální PDT, a PDT indukovanou rentgenovým zářením. Mnohé nanočástice, zvláště ty připravené click reakcemi vykazovaly pozoruhodné foto- a radiotoxické účinky na buněčné linie adenokarcinomu prostaty. Experimenty *in vivo* na myších také prokázaly, že subkutánní injekce těchto nanočástic je bezpečná v dávce až $0,1 \text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$. Prokázali jsme relevanci Mo_6 klastrů pro vývoj nových radiosenzitizačních nanosystémů. S ohledem na variabilitu složení ligandů Mo_6 , naše nové konstrukty a poznatky mohou vést k jejich biomedicínské aplikaci hlavně při radiodynamické terapii rakoviny.

Popsali jsme použití Aktivního Boranu jako katalyzátoru pro deoxygenace, hydrosilylace, dehalogenace a dehydrataci ethanolu. Ukázalo se, že Aktivní Boran je aktivní katalyzátor, který neztrácí za určitých podmínek aktivitu ani při teplotách nad $200 \text{ }^\circ\text{C}$. Z tohoto důvodu je možné uvažovat i o jeho použití v reakcích, které jsou běžně prováděny v průtokových reaktorech za vysokých teplot. Dále jsme zahájili spolupráci s kolegy z Taiwanu, kteří studují využití Aktivního Boranu jako nového materiálu pro superkapacity.

V roce 2023 jsme studovali protonovou vodivost porfyrinových zirkoničitých MOFů (metal organic framework). Zjistili jsme, že tyto jinak chemicky stálé materiály podléhají v prostředí zvýšené relativní vlhkosti (75 – 100 %) postupné degradaci, která je ještě zvláště zvýrazněna v přítomnosti adsorbovaných polárních molekul zvyšujících protonovou vodivost. V rozporu s literárními údaji o vysoké chemické stabilitě zirkoničitých MOFů nejsou tyto materiály s většími póry (3,2, resp. 2,0 nm) vhodnými protonovými vodiči. Také jsme srovnávali hydrolytickou stabilitu různých zirkoničitých MOFů lišících se vazností kovových klastrů a zjistili jsme, že na rozdíl od původních předpokladů je vaznost kovových center pravděpodobně jen jedním z mnoha faktorů ovlivňujících tuto stabilitu. Naše nové výsledky umožňují vhodně volit strukturu MOFů pro jejich aplikace, které vyžadují definovanou vzdušnou vlhkost (protonová vodivost) nebo vodné prostředí s definovaným pH (heterogenní katalýza, adsorpce polutantů). Také jsme popsali MOFy složené z fosfinátových linkerů jako potenciální adsorbenty pro odstraňování léčiv z odpadních vod.

Studovali jsme možnosti syntézy a reaktivitu boreniových solí s důrazem na vztah mezi jejich strukturou, reaktivitou a fluorescenčními vlastnostmi. Boreniové soli mají potenciál pro přípravu nenasycených sloučenin boru – boralkenů a heteroboralkenů,

kteře vykazují slibné luminiscenční a katalytické vlastnosti.

Podařilo se nám využít metodu Crystalline Sponge (CS) pro pokročilé stanovení struktur problematických látek, které se nedají určit konvenční krystalografií. Ve vybraném MOFu jsme určili modelovou strukturu boranového klastru, čímž jsme jako první v této oblasti potvrdili vhodnost metody CS pro danou skupinu látek.

Podrobně jsme se zaměřili na studium reaktivity nanokrystalických oxidů ceru. Ve spolupráci s Univerzitou J. E. Purkyně v Ústí nad Labem (UJEP) jsme popsali vliv povrchových vlastností různě modifikovaných nanooxidů CeO_2 na adsorpci anorganických fosforečnanů z vod a rozklad organofosforečnanů, zejména pesticidů. Výjimečná afinita CeO_2 k těmto sloučeninám může najít využití pro odstraňování toxických látek, jako jsou rezidua pesticidů, ale také při předcházení eutrofizaci vod vznikající v důsledku nadměrného množství fosforu. Právě popis faktorů ovlivňující adsorpční kapacitu a reaktivitu CeO_2 je klíčový.

V rámci mezinárodního projektu GreenWaterTech (cofundové výzvy Horizon AquaticPollutants) jsme studovali reaktivitu CeO_2 vůči dalším významným polutantům vod, jako jsou léčiva. Výsledky ukazují, že CeO_2 katalyticky štěpí i vazby např. v sulfonamidových (či beta-laktamových) typech antibiotik. Právě přítomnost těchto antibiotik ve vodách vede k vývoji antibiotické rezistence, kterou vyhlásila WHO jako jednu z největších globálních hrozeb pro veřejné zdraví a rozvoj. Proto se tomuto tématu chceme věnovat i v dalších letech.

Intenzivně jsme také studovali možnosti imobilizace funkčních nanočástic CeO_2 na nanovláknenných strukturách a membránách, např. pro filtraci vzduchu. Využili jsme různé strategie modifikace vláken, jako je plazmatem zesílená imobilizace nanočástic na fluorokarbonových vláknech (modifikační metodou ex post), či přidání koloidních roztoků CeO_2 přímo do zvláknovací směsi. V druhém případě jsme prokázali i zachování defosforylační aktivity upevněných nanočástic a připravili tak funkční nanovláknenné struktury na bázi polymeru PA6. Ty by mohly najít využití např. v ochranných filtračních maskách používaných při aplikaci organofosforečných pesticidů.

Popsali jsme dielektrické, magnetické a magnetoelektrické vlastnosti některých hexagonálních feritů strukturních typů Y a U ve formě orientovaných keramik a vrstev s cílem dosažení magnetoelektrického jevu při pokojové teplotě. Také jsme připravili tenké vrstvy vrstevnatých polovodičů $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dopovaných přechodnými kovy Ni, Co, Fe a studovali korelace jejich transportních, magnetických a termoelektrických vlastností.

Výzkum byl zaměřen i na iontové kapaliny imidazolového typu obsahující kov jako homogenní katalyzátor pro polymerizace s otevřením kruhu. Jako heterogenní katalyzátor pro stejný typ polymerizace byly připraveny i podvojně vrstevnaté hydroxidy a alkoxidy.

Použili jsme multivrstevnaté kompozity na bázi 2D MXene a Fe-dopovaný TiO_2 pro rozklad vody, 1D TiO_2 mikrotyčinky, uhlíkové nanotrubičky dopované kovy a 2D TiO_2 dopovaný ušlechtilými kovy a grafenem pro environmentální monitorování.

Zahájili jsme výzkum degradace mikroplastů pomocí fotokatalýzy. V oblasti fotoaktivních materiálů jsme pokračovali v designu, přípravě, charakterizaci a ladění jejich fyzikálně chemických, fotofyzikálních a fotochemických vlastností.

Aktivita v oblasti základního výzkumu sloučenin boru byla zaměřena na vývoj nových (poly)substitucí na borátových aniontech, heteroboranových a karboranových

klastrech, a pochopení jejich stereochemie a studiu fyzikálně chemických vlastností.

Pokračoval vývoj (poly)substituovaných metallakarboranových sendvičových strukturních bloků, které lze využít jako stavební jednotky v nanochemii a farmakologii.

Byly uskutečněny strukturní studie známých i nových typů heteroboranů založené na kvantově chemických výpočtech a difrakčních metodách a studie fyzikálně chemických vlastností, včetně studia reakčních mechanismů a energetické bilance.

V oblasti fotoaktivních molekul byla prostudována luminiscence u fúzovaného klastru $\text{syn-B}_{18}\text{H}_{22}$ v pevném stavu. Tato studie představuje první příklad mechanochromního posunu luminiscence klastrových boranů a rozšířila oblast známých luminiscenčních materiálů na základě sloučen boru. Látky jsou i vhodnou komponentou pro tvorbu samoskladných monomolekulárních vrstev.

Byly prostudovány typy reakcí heteroboranů a halogenovaných boranů, které vedou k makropolyhedrálním látkám s fúzovaným skeletem. Byly prostudovány spektrální, strukturní a fotofyzikální vlastnosti těchto systémů.

V oblasti potenciálních medicínálních aplikací boranových sloučenin byla dokončena substituce kobalt bis(dikarbollid)ového iontu slabě bazickými amoniiovými skupinami a ověřena antibakteriální účinnost těchto látek. Byla rozpracována substituční chemie tohoto iontu dusíkatými substituenty ($-\text{N}_3$, $-\text{CON}_3$, CN) připojenými k atomům uhlíku a byla prostudována jejich chemická přeměna na $-\text{NH}_2$ skupiny. U aminů byl sledován vliv objemného iontového klastru na acidobazické vlastnosti.

Pokračovalo studium chiralit borových klastrových sloučenin a bylo dosaženo pokroku v metodách pro separaci enantiomerů. Byla připravena řada nových asymetrických derivátů kobalt bis(dikarbollid)ového iontu, které vykazují omezenou konformační mobilitu a axiální chiralitu, a bylo prostudováno jejich chirální dělení. Byly připraveny aktivní látky pro studium vlivu chiralit na biologické vlastnosti sloučenin a další aplikace.

Ve spolupráci s University Hohenheim a dalšími partnery ze SRN byla věnována pozornost vlastnostem originálních pikto-gen a chalkogenaheteroboranů, včetně termodynamiky jejich vzniku; byl prokázán vznik ojedinělých dikationtů založených na polyhalogenovaných heteroboranech.

Vědci našeho týmu se účastnili na činnosti konsorcia složeného z vědců z Finska, České republiky, Německa a Spojeného království, které spolupracuje na ambiciózním projektu zaměřeném na průlomová řešení v oblasti obnovitelné energie na základě jaderné fúze. Projekt *Vortex4Fusion* (V4F), podpořený grantem EU Pathfinders, si klade za cíl vyvinout principy nové technologie schopné dosáhnout řízené kontroly nad fúzní reakcí, která je iniciována interakcí vysoce energetického laserového záření se speciálně navrženými boranovými terči.

V oboru environmentální geochemie pokračovaly výzkumné aktivity zaměřené na zkoumání obsahu manganu a zinku v listech stromů v horských lesích s půdami poškozenými kyselými dešti a imisemi. Ukázalo se, že v oblasti Harzu v Německu a části Moravskoslezských Beskyd, které byly zasaženy obzvláště silně kyselými dešti z metalurgických výroby, mají břízy v listech podstatně zvýšené obsahy manganu a v Beskydech i zinku. Nečekaným výsledkem studie byl vliv transportů iontů Mn^{2+} po svahu v důsledku acidifikace půd a mobilizace iontů manganu, kterou potvrdilo i

srovnání s daty ze tří předcházejících studií vedených v Norsku. Bylo zjištěno, že příjem pro rostlinu nadbytečných množství manganu (Mn) v listech stimuluje nedostatek živin (hořčíku nebo draslíku). Obsah Mn v listech bříz by tedy mohl sloužit k mapování dvou důsledků poškození půd kyselými dešti: vyluhování živin a mobilizace Mn.

Byly shrnuty a publikovány výsledky geochemického mapování kontaminace půd celé ČR rizikovými prvky (např. Mn, Cu). Zdůvodnili jsme, proč nestačí v současnosti legislativou nařízené monitorování obsahu rizikových prvků v půdách k rozlišení přírodních a antropogenních příčin kontaminací půd těmito prvky a nastínili směry dalšího výzkumu. Podrobné mapování kontaminace půd v mostecké pánvi, hlavně na Teplicku, bylo zaměřeno na vliv elektráren na obsah rizikových prvků v půdách. Výsledky nesporně prokázaly, že se vliv elektráren na složení půd mostecké pánve od konce dvacátého století značně přeceňoval, protože hlavní podíl na vysokých obsazích As a Pb v půdách tam mají především půdní splachy ze svahů Krušných hor. Krušné hory přitom představují patrně největší geogenní anomálie, pokud jde o obsahy As a Pb v půdách střední Evropy.

Provenienční analýza výtvarného umění byla zaměřena na nalezení vhodného postupu odlišování pigmentových smaltů vyráběných z různých surovin v oblasti Krušnohoří. Výzkum nově zahrnul i starší kobaltová skla. Byla například popsána provenience a technologie výroby unikátních středověkých Co-obsahujících skleněných tesar z Malborku, Polsko. S využitím metod analýzy stopových prvků (LA-ICP-MS) byly také nalezeny rozlišující znaky důležité pro posouzení místa těžby různých přírodních azuritů v období středověku a byly zahájeny experimenty imitující podmínky vzniku zeleného měďnatého pigmentu proměnlivého složení vyráběného v pozdním středověku srážením z důlních vod. V rámci studia degradačních procesů byla pozornost věnována především charakterizaci a studiu teplotního chování syntetizovaných olovnatých a rtuťnatých karboxylátů vyšších mastných kyselin, jež vznikají při tzv. saponifikaci malířských vrstev obsahujících mastná pojiva (vysýchavé oleje, žlutek). Sledováno bylo především chování při teplotách kolem 100 °C, které byly lokálně dosažitelné při starších konzervačních zásazích (např. zpevnění zteřelého plátna novým pomocí nažehlování). Dále probíhaly dlouhodobé experimenty sledující vliv vlhkosti na tvorbu kovových mýdel v modelových barevných vrstvách. Ve spolupráci s ISTA Vídeň byly studovány karboxyláty kadmia ve vrstvách vystavených fotodegradaci různými zdroji záření. ALMA se v rámci konsorcia evropských pracovišť orientujících se na výzkum historických materiálů v objektech kulturního dědictví podílela na podání návrhu pro přidělení přístrojového času (Historical Materials Block Allocation Group) pro roky 2024-26 na synchrotronu ESRF v Grenoblu.

V oblasti aplikované anorganické chemie jsme pracovali na vývoji

(i) pokročilých konstrukčních materiálů pro jaderný průmysl:

- konstrukčních materiálů na geopolymerní bázi, zejména pro stínění ionizujícího záření a mající zvýšenou odolnost vůči působení roztoků s obsahem kyseliny borité;
- nízkoalkalických konstrukčních materiálů (betonů) pro úložiště s bentonitovými ochrannými bariérami – nízkoalkalické betony vykazují ve svém výluhu nízký obsah kationtů I. skupiny, které narušují stabilitu ochranných bentonitových vrstev, a navíc tyto betony vykazují dostatečnou odolnost vůči hořečnatým iontům přítomným v bentonitových výluzích.

(ii) systémů a zařízení pro reakční a suspenzní anorganický 3D tisk:

- projekt reakčního a suspenzního anorganického 3D tisku byl rozšířen o nový systém anorganického 3D tisku na bázi laserového sintrování, pro tyto účely byly nalezeny původní anorganické materiály, levné a ekologické, které umožňují ekonomicky dostupné teplotně stabilní výtisky;
- suspenze původně určené pro 3D tisk s vysokými obsahy polévatého popele byly nově použity pro přípravu kovoliteckých forem.

(iii) ekologických a žárovzdorných pojivových systémů z odpadních surovin jako náhrady cementových pojiv:

- byly připraveny ekologické a žárovzdorné pojivové systémy z odpadních surovin pro celkové nebo částečné náhrady cementových pojiv pro zpracování odpadních surovin na kvalifikované produkty, zejména netříděných cihelných sutí, které jsou znečištěny zeminou, plasty, betonem a dřevem;
- bylo testováno použití nových ekologických pojiv pro nezpracovatelné písky saharského typu s vysokými obsahy rozpustných solí, prachu s vysokým obsahem kaolinů a současně s tvarem částic písku s obroušeným povrchem nevhodným pro jejich použití s klasickými portlandskými pojivy.

(iv) ekologických řešení:

- rozvinuli jsme aktivity vedoucí ke komercializaci nových ekologických prostředků pro sanace bioticky napadených fasád.

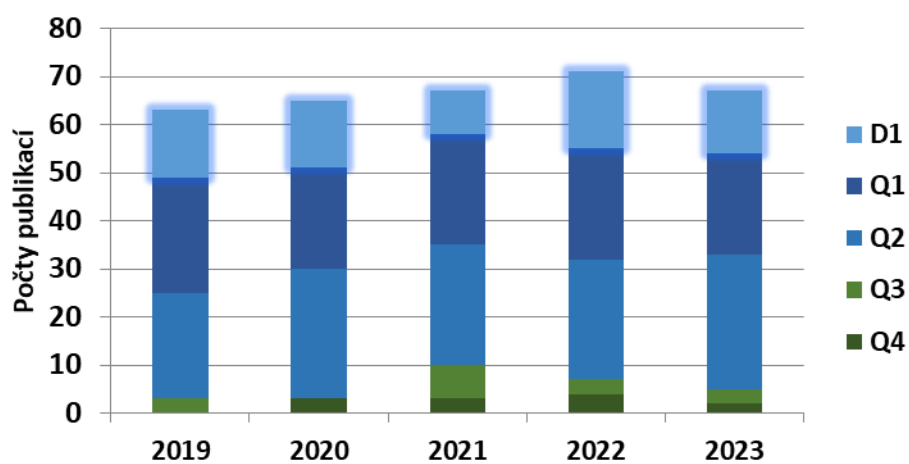
(v) sorbentů a fotokatalyzátorů pro dekontaminaci prostředí:

- sorbenty na bázi oxidu železa modifikovaného zinkem a na bázi titanu pro dekontaminaci bakterií a selenu z vody;
- kompozity zeolitu a zeolity na bázi titanu jako sorbenty pro dekontaminaci těžkých kovů a radionuklidů v odpadních vodách (např. z jaderných elektráren);
- optimalizovali jsme technologii výroby plovoucích fotokatalyzátorů se synergickou adsorpční schopností na bázi napěněného skla, fotoaktivních kompozitů vodní sklo/TiO₂, pro mineralizaci organických polutantů.

Získané výsledky byly v roce 2023 zveřejněny v 67 publikacích v mezinárodních impaktovaných časopisech, z toho významný podíl v časopisech, jejichž kvalita odpovídá prvnímu decilu D1 (13 článků) a prvnímu kvartilu Q1 (21 článků) v oboru (dle JCI). Ve 46 % publikací jsou pracovníci ÚACH korespondujícími autory. Vysoké procento publikací vzniklo v rámci mezinárodních spoluprací – celkem 54 %.

Na následujícím obrázku je znázorněn vývoj počtu publikací pracovníků ústavu v období 2019–2023.

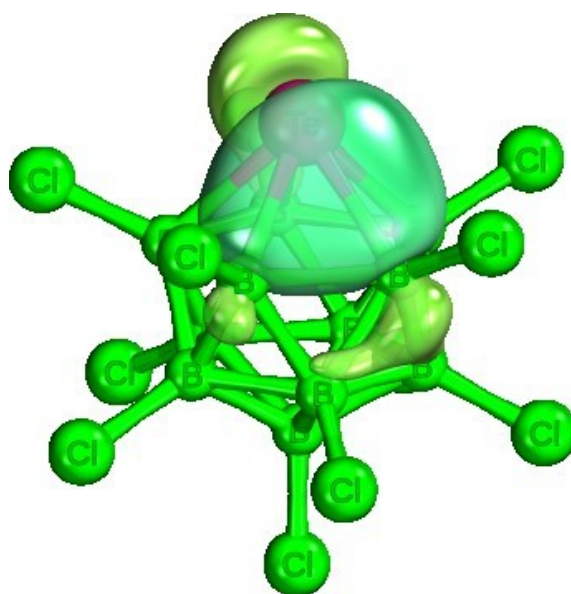
Publikační aktivita 2019 - 2023
(dle JCI)



Významné výsledky s uvedením citací:

(1) Příprava a strukturní charakteristiku dvou Platónových těles: oktaedrického a ikosaedrálního teluraboranu s potenciální aplikací v mikroelektronice

Oktaedr a ikosaedr patří mezi pět Platónových těles a geometrie těchto těles jsou rozhodující v mnoha přírodních aspektech. Tyto geometrické tvary byly rozpoznány v příslušných teluraboranech s výjimečně dlouhými tělesovými uhlopříčkami. Kvantově-chemická analýza ikosaedrálního teluraboranu odhalila zcela unikátní čtyřcentrový-dvouelektronový vazebný motiv. Oktaedrický teluraboran může být velmi zajímavý z hlediska feroelektřiny a rovinných vln.



Ikosaedrální teluraboran s vybranými vazebnými motivy.

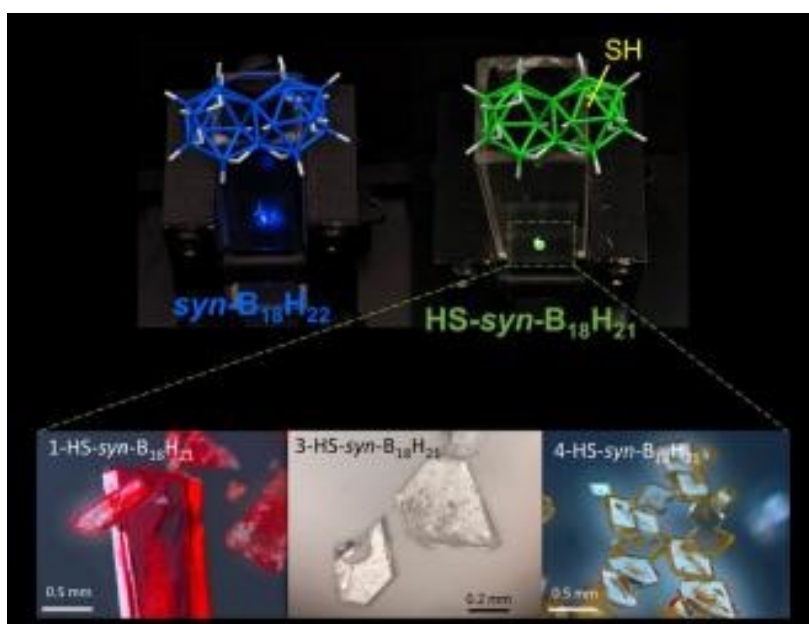
W. Keller, J. Ballmann, M. B. Sárosi, J. Fanfrlík and D. Hnyk*:
The Telluraboranes *closo*-TeB₅Cl₅ and *closo*-TeB₁₁Cl₁₁ with Exceptionally Long Body Diagonals:
Synthetic and Bonding Motifs for Innovative Octahedral and Icosahedral Geometries.
Angewandte Chemie International Edition, **2023**, e202219018; D1/JCI

Spolupracující subjekt:

Institut für Chemie, Universität Hohenheim, Německo; Anorganisch-Chemisches Institut, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Německo; Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha.

(2) Překvapivý objev luminiscenčních vlastností makropolyedráního boranu $\text{syn-B}_{18}\text{H}_{22}$, jeho izomerní thioly a jejich využití k přípravě boranových monovrstev

V rámci studie jsme překvapivě objevili u makropolyedráního boranu $\text{syn-B}_{18}\text{H}_{22}$ v pevné fázi luminiscenční aktivitu. Připravili jsme z něj tři izomerní thioly, kompletně jsme je charakterizovali včetně strukturní analýzy, která odhalila několik polymorfních forem, a ukázali jsme cestu k jejich využití pro přípravu čistě boranových (bezuhlíkových) monomolekulárních vrstev.



Luminiscence makropolyedráního boranu $\text{syn-B}_{18}\text{H}_{22}$ včetně příslušných thiolových (HS-) izomerních derivátů a jejich krystalické podoby.

Grafika ukazuje modrou luminiscenci makropolyedráního boranu $\text{syn-B}_{18}\text{H}_{22}$ a zelenou luminiscenci jeho thiolového (HS-) derivátu. Ve spodní části je ukázána krystalická podoba tří příslušných izomerních mono-thiolů.

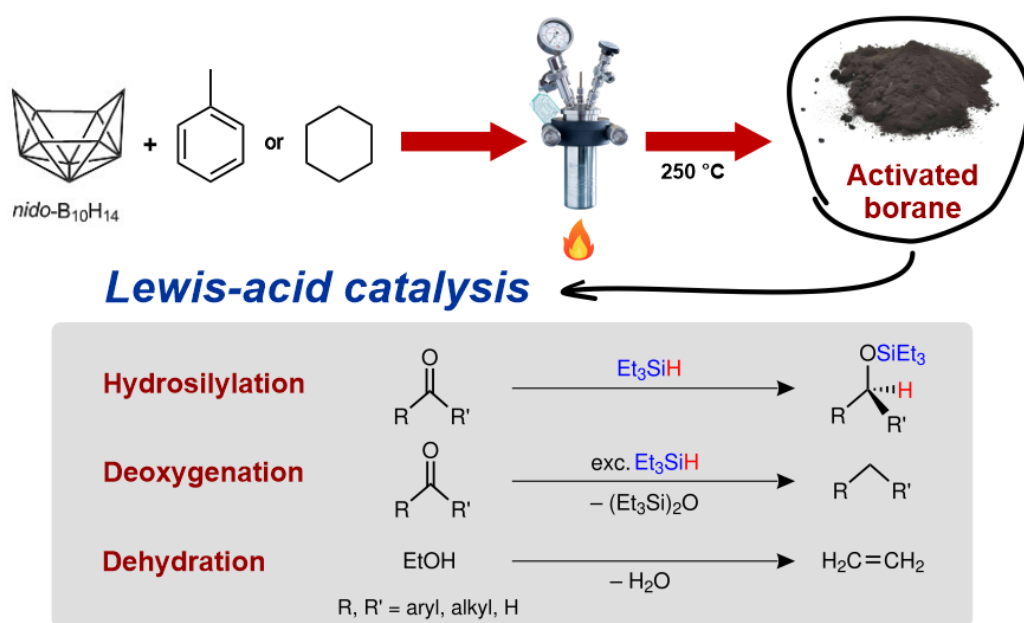
D. K. Patel, S. B. Sreekala, K. Kirakci, J. Macháček, M. Kučeráková, J. Bould, M. Dušek, M. Frey, C. Neumann, S. Ghosh*, A. Turchanin*, T. Pradeep*, T. Baše*:
Macropolyhedral $\text{syn-B}_{18}\text{H}_{22}$, the “Forgotten” Isomer.
J. Am. Chem. Soc., **2023**, 145, 32, 17975-17986; D1/JCI

Spolupracující subjekt:

Indian Institute of Technology, Madras, Chennai, Indie; Fyzikální ústav AV ČR.

(3) Inovativní katalyzátor otevírající cestu k ekologičtějším plastům

S plasty se pojí řada ekologických problémů, které jsou celosvětově skloňovány. Jedním z nich je jejich výroba z ropy. Alternativní cestou je příprava plastů z přírodních sloučenin. Tyto procesy však neběží samovolně a je nutné je katalyzovat. V ÚACH se podařilo vyvinout inovativní katalyzátor, tzv. Aktivní boran, jehož unikátní porézní strukturu lze využít např. k přeměně etanolu na etylen, hlavní složku při výrobě polyetylenů. Ekologičtější plasty by tak mohly být opět lépe dostupné.



Schematické znázornění přípravy a katalytických vlastností Aktivního boranu.

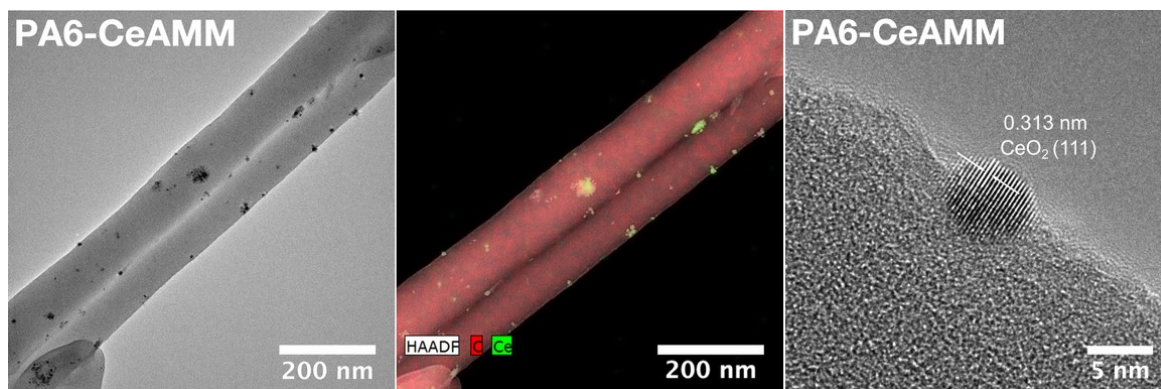
M. Lamač*, B. Urban, M. Horáček, D. Bůžek, L. Leonová, A. Stýskalík, A. Vykydalová, K. Škoch, M. Kloda, A. Mahun, L. Kobera, K. Lang, M. G.S. Londesborough, J. Demel*: Activated Borane: A Porous Borane Cluster Polymer as an Efficient Lewis Acid-Based Catalyst. *ACS Catalysis* **2023**, 13, 14614–14626; Q1/JCI

Spolupracující subjekt:

Masarykova univerzita, Brno; Ústav makromolekulární chemie AV ČR; Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR.

(4) Imobilizace funkčních nanočástic CeO₂ na nanovláčkách

Dva typy polymerních nanovláken (PA6 a PVDF) byly připraveny elektrovlákňováním a tato nanovláčna byla různými strategiemi modifikována pomocí funkčních nanočástic CeO₂ (CeNPs). Na povrchu plazmaticky upravených PVDF vláken byly ukotveny CeNPs ex post, zatímco při použití PA6 nanovláken byly koloidní roztoky CeNPs smíchány přímo s polymerem před samotným zvlákňováním. U funkčních nanovláken bylo ověřeno zachování robustní katalytické reaktivity CeNPs pomocí sledování rozkladu tří molekul fosfodiesterů ve vodě.



CeO₂ nanočástice ukotvené na polymerních PA6 nanovláčkách

Snímky z elektronového mikroskopu při různém zvětšení ukazují polymerní nanovláčna s ukotvenými nanočásticemi CeO₂ (vlevo) s barevnou vizualizací prvkového složení (uhlík a cer) (uprostřed) a detail vysoce krystalické nanočástice CeO₂ upevněné na povrchu nanovláčna (vpravo).

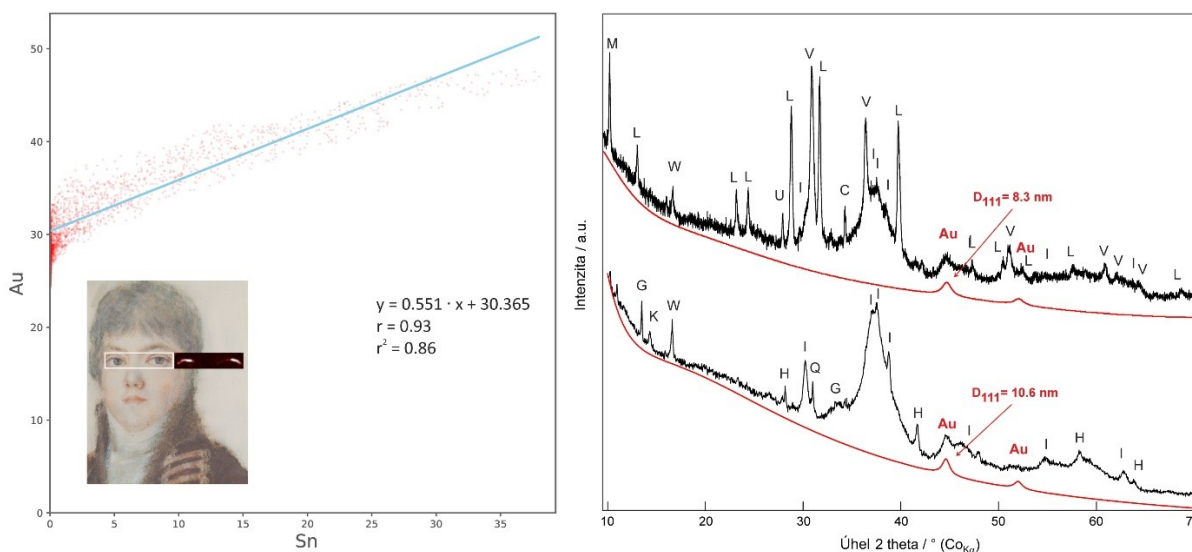
J. Henych*, P. Ryšánek, M. Štastný, Z. Němečková, S. Adamec, M. Kormunda, S. Kamínková, K. Hamalová, J. Tolasz, P. Janoš:
Electrospun PA6 Nanofibers Bearing the CeO₂ Dephosphorylation Catalyst.
ACS Omega **2023**, 8, 29, 26610-26618; Q2/JCI

M. Kormunda, P. Ryšánek*, T. Homola, J. Henych, J. Tolasz, J. Hoskovec, P. Čapková:
Plasma-enhanced immobilization of cerium oxide nanoparticles on a fluorocarbon-based nanofibrous membranes.
J. Appl. Polym. Sci. **2023**, 140, 35, e54335; Q2/JCI

Spolupracující subjekt:
Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem.

(5) Nanočástice zlata ve vídeňských miniaturách 19. století

Neinvasivní výzkum miniaturních portrétů na slonovině přinesl četná překvapivá zjištění. Některá z nich svědčí o technologických souvislostech akvarelové/kvašové malby miniatur s barvením skla a keramiky. V některých portrétech byl například prokázán pigment zvaný Cassiův purpur, tvořený nanočásticemi zlata, které používali již v 17. století skláři k výrobě rubínového skla. Následně byl pigment využíván k barvení glazur a známých postupů jeho přípravy začalo přibývat. V malířských dílech (kromě miniatur) se nevyskytuje. S využitím nových postupů neinvasivní analýzy objektů, jako je rtg. fluorescenční skenování (MA-XRF), environmentální rastrovací elektronová mikroskopie (EREM) a také laboratorní rtg. difrakce (XRPD) bylo zjištěno, že pigment objevený v miniaturách první poloviny 19. století byl vyroben podle tradičního (Cassiova) postupu, využívajícího jako redukčního činidla cín, který ve formě SnO_2 zůstával i součástí výsledného produktu. Analyticky je v dílech průkazná velmi dobrá korelace Au a Sn v purpurové barvě a výpočtem z difraktogramů bylo možné určit i průměrnou velikost nanočástic Au odpovídající rovněž hodnotám známým z glazur (kolem 10 nm). Velikost nanočástic je důležitá pro dosažení požadovaného odstínu, což bylo následně potvrzeno i při úspěšné laboratorní replikaci pigmentu.



Výsledky analýz metodami MA-XRF (vlevo) a XRPD (vpravo)

Vlevo: korelace Au/Sn vypočtené z MA-XRF map miniatury mladého důstojníka, kde byl Cassiův purpur použit k malbě tenkých linek horních očních víček; na obrázku jsou vyznačeny oblasti výpočtu a výsledné mapy Au a Sn (bílé pixely označují nejlepší překryvy Au a Sn); vpravo: difraktogramy s výpočtem velikosti nanočástic Au v purpurovém pigmentu nalezeném na dvou dalších miniaturách

Z. Širillová, J. Hradilová, M. Pech, S. Švarcová, P. Bezdička, V. Neděla, D. Hradil*:
Gold nanoparticles in painted miniatures on ivory: Non-invasive evidence and characterisation.
Dyes and Pigments **2023**, 210, 111015; Q1/JCI

Spolupracující subjekt: Akademie výtvarných umění v Praze, ÚPT AV ČR

2. Pedagogická spolupráce s vysokými školami

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

Bakalářské a magisterské studijní programy:

Pracovníci ústavu se v r. 2023 podíleli na zajištění přednášek, seminářů a vedení prací v pregraduálních programech Chemie a Geologie (PřF UK v Praze), Chemie (PedF UK v Praze), Ekologie a ochrana prostředí, Ochrana životního prostředí a Technologie pro ochranu životního prostředí (FŽP UJEP v Ústí nad Labem), Chemie a Analytická chemie životního prostředí a toxikologie (PřF UJEP v Ústí nad Labem), Materiálové vědy a analýza materiálu a Materiálové inženýrství (FSI UJEP v Ústí nad Labem) a Materiálové inženýrství (FSv ČVUT). Působí rovněž ve zkušebních a oborových komisích.

V průběhu letního semestru 2022/2023 a zimního semestru 2023/2024 přednášeli pracovníci ústavu v uvedených programech téměř 400 hodin.

Doktorské studijní programy:

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

V r. 2023 pracovalo pod supervizí ústavních školitelů 16 studentů DSP. Na řešení výzkumných projektů se účastnili rovněž studenti magisterských programů.

3. Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou

3a) Společné projekty VaV podporované z veřejných prostředků

3a-1) Solární dekontaminace povrchové vody pomocí plovoucího fotokatalyzátoru se synergickou sorpční funkcí

Poskytovatel: TAČR, DELTA 2

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

Dosažený výsledek a jeho uplatnění:

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

Publikace:

E. Plížingrová, M. Motlochová, J. Šubrt, L. Belháčová, H. Golasovská, Solar decontamination of surface water using a floating photocatalyst with synergistic sorption function; sborník Photocatalytic a superhydrophylic surfaces (PSS2023), Proceedings ISBN 978-80-7592-235-9, str. 48.

L. Belháčová, T. Supiňková, J. Šubrt, H. Golasovská, Photocatalytic degradation of organic pollutants using sunlight from laboratory to outdoor conditions; sborník Photocatalytic a superhydrophylic surfaces (PSS2023), Proceedings ISBN 978-80-7592-235-9, str. 32.

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

V r. 2023 byly uzavřeny významnější hospodářské smlouvy se 13 odběrateli a byly řešeny 3 projekty smluvního výzkumu.

Nejvýznamnější výsledky:

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

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

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

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

3b – 2) Materiály pro jaderný průmysl

Zadavatel: Škoda JS a.s., Plzeň

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

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

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

Zadavatel: Quinta Analytica, s.r.o.

Anotace: V roce 2023 pokračovaly analýzy látek pomocí práškové rentgenové difrakce, které jsou vyvíjeny zadavatelem pro farmaceutické účely. U těchto látek byla sledována dlouhodobá stabilita aktivních látek, které byly podrobovány různým atmosférickými podmínkám (relativní vlhkost, čas).

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

3b – 4) Stanovení velikosti povrchu a porozity nanokrystalických práškových materiálech na bázi ZnO

Zadavatel: Bochemie a.s.

Anotace: Metodou adsorpce a desorpce plynného dusíku při -196 °C byly získány hodnoty velikosti povrchu a porozity pro zaslané vzorky nanočásticového oxidu zinečnatého vyráběného ve firmě Bochemie a.s.

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

3c) Další spolupráce v oblastech s aplikačním potenciálem

Výzkumný ústav pro hnědé uhlí a.s. - Vývoj materiálů zpracovávajících polévaté popílků a strusky.

Spolupráce je zaměřena na zpracování polévatých popílků a strusky suspenzním 3D tiskem s využitím jako keramické materiály pro vysokoteplotní aplikace.

3d) Patenty, užité vzory, vynálezy

V r. 2023 byly podány tři užité vzory:

1. Š. Michna, J. Novotný M. Jaskevič, A. Knaislová, ÚJEP; Z. Černý, P. Rosypal, J. Plocek, ÚACH AV ČR; L. Anděl, P. Schmidt, Z. Strolená, Výzkumný ústav hnědého uhlí, a.s.; J. Křen, Sev.en Inntech a.s., Most:
Vnější keramická obkladová tvarovka, PUV 2022-40531, č. zápisu 37074
2. Š. Michna, J. Novotný M. Jaskevič, A. Knaislová, ÚJEP; Z. Černý, P. Rosypal, J. Plocek, ÚACH AV ČR; L. Anděl, P. Schmidt, Z. Strolená, Výzkumný ústav hnědého uhlí, a.s.; J. Křen, Sev.en Inntech a.s., Most:
Anorganická směs na bázi geopolymerní matrice, zejména pro technologii 3D tisku, PUV 2022-40639, č. zápisu 36934
3. Š. Michna, J. Novotný M. Jaskevič, A. Knaislová, ÚJEP; Z. Černý, P. Rosypal, J. Plocek, ÚACH AV ČR; L. Anděl, P. Schmidt, Z. Strolená, Výzkumný ústav hnědého uhlí, a.s.; J. Křen, Sev.en Inntech a.s., Most:
Protihluková tvarovka v podobě segmentu protihlukové stěny, PUV 2023-40711, č. zápisu 37042,

V r. 2023 nebyla uzavřena žádná licenční smlouva.

4. Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště

4a) Projekty řešené v rámci mezinárodních vědeckých programů

4a-1) Green Ultrafiltration Water Cleaning Technologies (GreenWaterTech, H2020 M-ERA.NET 2 Cofund, 6 spoluřešitelů, 3 účastnické státy)

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

4a-2) SysTem for Safe Biological chEmical Radiological and Nuclear Assessment, Rescue and Decontamination (STBERNARD, Horizon Europe, 18 řešitelů, 9 účastnických států)

4a-3) Laser vortex beams with extreme orbital angular momentum for aneutronic fusion (VORTEX-4-FUSION, Horizon Europe, 7 řešitelů, 4 účastnické státy)

4b) Konference s mezinárodní účastí, které ÚACH spolupřádal

V r. 2023 ústav nebyl (spolu)pořadatelem žádné konference s mezinárodní účastí.

4c) Aktuální dohody se zahraničními pracovišti

- 4c-1) Téma: Klecové molekuly v samo-organizovaných monomolekulárních vrstvách; partner University of California in Los Angeles / California NanoSystems Institute, USA.
- 4c-2) Téma: Využití samo-organizovaných monomolekulárních vrstev ve smart textiles; partner Albstadt-Sigmaringen University, Department of Engineering, Textile Product Technology, Německo.
- 4c-3) Téma: Výzkum v oblasti luminiscenčních materiálů; partner Instituto de Ciencia de Materials de Sevilla, Španělsko.
- 4c-4) Téma: Projekt *Vortex4Fusion* (V4F). Konsorcium výzkumníků z Finska (Tampere University, Tampere), České republiky (ÚACH AV ČR, Ústav fyziky plazmatu AV ČR), Německa (Leibniz Institute of Photonic Technology, Jena, a Juelich Research Centre, Juelich) a Spojeného království (Modus Research and Innovation Ltd, Dundee).

4d) Další vědecké spolupráce

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

Téma: Vývoj katalyzátorů na bázi směsných oxidů kovů pro rozklad těkavých organických látek; partner Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry, Bulharská akademie věd, Bulharsko. Bilaterální mezikadernická spolupráce.

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

Téma: Orientované tenké vrstvy multiferoických hexagonálních feritů s magneticky indukovanou elektrickou polarizací; partner: Center for Novel States of Complex Materials Research, Seoul National University, Seoul, Jižní Korea.

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

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

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

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

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

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

Téma: Testování materiálů pro stínění neutronového záření; partner: PRAGO-ANORG s.r.o. Praha a CQFD Composites, Mulhouse, Francie.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Téma: Vývoj materiálů s vysokou adsorpční kapacitou pro odstraňování selenu z pitné vody; partner: CSIR-National Environmental Engineering Research Institute

(NEERI), Nagpur, Indie.

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

Téma: Vývoj TiO₂ materiálů s vysokým sorpčním povrchem; partneři: Dept. of Chemistry, Lund University, Švédsko a Materiálovotechnická fakulta a Centrum pro nanodiagnostiku, Slovenská technická univerzita v Bratislavě, Bratislava, Slovensko.

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

Témata: Stočení původních 2D materiálů pomocí uzavřeného elektrolytu a kovové uhlíkové filmy z funkcionalizovaného grafenu; partner: Centre for Advanced 2D Materials, National University of Singapore, Singapore.

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

Témata: Cu(II) komplexy a jejich biologická aktivita a syntéza bezfluoridových nanotrubiček TiO₂ pro fotokatalytickou degradaci organických polutantů; partner: Univerzita Komenského v Bratislavě, Slovensko.

Téma: Fotoindukovaná degradace mikroplastů pro výrobu vodíku pomocí modifikovaných nanostruktur TiO₂; partner: Vienna Univ. Technology, Rakousko.

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

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

Téma: Analýza moderního umění, syntetické pigmenty a jejich degradace; partner: Academy of Fine Arts Vienna- Institute of Science and Technology in Art (ISTA), Vídeň, Rakousko.

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

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

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

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

Téma: Vývoj říčních systémů a shromažďování informací o geologii a průmyslových aktivitách vybraných částí Německa; partner: Universität Leipzig, Německo.

Téma: Vliv půdních a topografických podmínek na příjem manganu břízami; partner:

Norská geologická služba, Norsko.

5. Vzdělávací činnost pracovníků ústavu

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

IV. Hodnocení další a jiné činnosti:

V rámci jiné činnosti byly v r. 2023 uzavřeny smlouvy v hodnotě 1684 tis. Kč.

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

Kontrolní orgány GA ČR provedly v r. 2023 kontrolu, jejímž předmětem bylo hospodaření s veřejnými finančními prostředky u sedmi projektů v období r. 2022. Závěr: Nebyly zjištěny žádné nedostatky.

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

Ústav hospodařil v r. 2023 s vyrovnaným rozpočtem.

Výše institucionální neinvestiční dotace poskytnuté z rozhodnutí zřizovatele v r. 2023 byla přibližně o 5% vyšší než v r. 2022. Vedle institucionální dotace byla v r. 2023 část rozpočtu ústavu (cca 30% neinvestičních nákladů) tvořena účelovými prostředky (MŠMT, GA ČR, TA ČR, Horizon 2020 a Horizon Europe).

Vedení ústavu důsledně dbá na vyhledávání možností aplikací výsledků badatelského výzkumu a uplatňování práv duševního vlastnictví v oblasti aplikovaných výsledků. Kromě smluv o dílo v rámci jiné činnosti (1684 tis. Kč., viz výše) byl v r. 2023 v rámci hlavní činnosti realizován smluvní výzkum ve výši 1225 tis. Kč. Výnosy z uzavřených licenčních smluv činily 509 tis. Kč. Příjmy ze smluv a licencí doplňují rozpočet ústavu tvořený převážně dotacemi ze státních prostředků.

VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště:

Vývoj činnosti ÚACH bude v souladu s jeho posláním směřován na různé aspekty anorganické chemie. Anorganická chemie se dynamicky vyvíjí a její vliv přerůstá i do jiných oblastí přírodních věd, jako jsou materiálové, fyzikální, bio a environmentální vědy a další. Naše znalosti metod syntéz, fotochemie, analýzy pevných látek, analytické a kvantové chemie, katalýzy a dalších oblastí chemie nám umožňují aktivní práci na řadě multidisciplinárních projektů na mezinárodní úrovni. Objevujeme nové molekuly, nanomateriály a materiály se specifickými vlastnostmi, např. luminiscenčními, optickými, sorpčními, katalytickými. Tyto produkty nabízejí široké spektrum využití, např. pro odstraňování toxických látek, pro konstrukci baktericidních povrchů, jsou komponenty senzorů či laserů, účinnými katalyzátory nebo mohou být využity pro diagnostiku a terapii v medicíně. Náš chemický pohled také přispívá k rozvoji geochemie a umožňuje hodnotit výtvarná díla z hlediska jejich původnosti, stáří a provenience. Na badatelský výzkum v řadě případů navazuje výzkum a vývoj s cílem využití výsledků při inovacích stávajících technologických postupů a zavádění nových vyspělých technologií. Hlavní směry výzkumu v roce 2024 vycházejí z výzkumných záměrů ÚACH a z výsledků národních a mezinárodních projektů dosažených v předchozích letech, které mají přesah do roku 2025 a dále.

Zaměříme se na vývoj oktaedrických klastrových komplexů molybdenu (Mo_6), které jsou účinnými fotosenzitizátory singletového kyslíku a také působí jako radiosenzitizátory, tj. sloučeniny, které stimulují produkci reaktivních forem kyslíku v tumorové tkáni po ozáření rentgenovým zářením. Protože nádory většiny typů rakoviny mají významně snížený obsah kyslíku, což snižuje účinnost radiodynamické terapie, naší motivací je vyvinout nanočástice složené z Mo_6 klastrů a biokompatibilních polymerů, které jsou aktivními radiosenzitizátory i za hypoxických podmínek. Navrhované struktury s obsahem těžkých atomů zvyšují lokální radiální dávky, a navíc by měly transportovat kyslík přímo do ozařovaných oblastí nebo dokonce potřebu kyslíku eliminovat. Tyto biomateriály budou testovány *in vitro* na rakovinových buněčných liniích kultivovaných za hypoxických podmínek nebo ve formě 3D sféroidů ve spolupráci s týmem z VŠCHT, Praha.

Budeme pokračovat ve využití Aktivního Boranu jako Lewisovsky kyselého heterogenního katalyzátoru. Zaměříme se na reakce s velkým společenským potenciálem, jako je například dehalogenace, dehydratace ethanolu na ethylen a hydrogenace pomocí molekulárního vodíku. Bude se jednat především o stanovení možností katalyzátoru, jeho stability za vysokých teplot a v přítomnosti různých druhů reaktantů. Výhodou Aktivního Boranu je, že neobsahuje halogeny ani přechodné kovy, takže jeho environmentální stopa je malá. V delším horizontu se chceme věnovat reakcím simulujícím reálné podmínky, např. pro recyklaci plastů. Dále budeme studovat kompozity Aktivního Boranu s jinými porézními strukturami za účelem snížení ceny katalyzátoru. Také budeme studovat další možné aplikace Aktivního Boranu, především formou spoluprací (superkapacitory ve spolupráci s kolegy z Taiwanu).

Budeme i nadále pokračovat ve výzkumu MOFů. Zaměříme se na robustní struktury karboxylátových MOFů, vliv konektivity na jejich stabilitu a i na jejich fosfinátové analogy. Pomocí postsyntetické modifikace a substituce navržených organických

ligandů budou do struktur materiálů zavedeny funkční skupiny zvyšující mobilitu protonů v porézních strukturách. Ve spolupráci s Univerzitou Pardubice bude určena jejich protonová vodivost za různé teploty a relativní vlhkosti se snahou nalézt materiál s nejlepší protonovou vodivostí a dlouhodobou chemickou stabilitou. Ve spolupráci s Fakultou životního prostředí UJEP se zaměříme na up-cykling organických látek (např. kyseliny tereftalové) z odpadních polymerních materiálů (PET, PES, tkaniny z těchto polymerů apod.). Kyselina tereftalová je konstrukčním prvkem (linkerem) řady MOFů a může být použita jako sekundární surovina pro jejich syntézu. Dosud se většina MOFů připravuje z chemicky čistých surovin, což snižuje atraktivitu těchto materiálů. Budeme také řešit i užité vlastnosti takto připravených MOFů, zejména vlastností důležitých pro environmentální aplikace, např. katalytický rozklad organofosfátových polutantů, nebo adsorpce polutantů.

Navážeme na předchozí práci ve výzkumu kationtových sloučenin boru jako Lewisovských superkyselin. Budeme dále pracovat na optimalizaci jejich designu s cílem modulovat jejich luminiscenční vlastnosti, jako jsou jejich emisní maxima a luminiscenční kvantové výtěžky. Pokusíme se připravit jednoduchý luminiscenční molekulární senzor. Dále budeme rozvíjet reaktivitu a studium možností využití boreniových solí jako katalyzátorů pro reakce typu C-H aktivace, hydroborace či redukce CO₂.

Na základě našich výsledků z roku 2023 plánujeme rozvoj metody Crystalline Sponge (CS) v celém jejím rozsahu a významně rozšířit naše možnosti difrakčních technik na sloučeniny, které problematicky krystalují, např. z důvodu jejich malé dostupnosti, nevhodnosti (plynné či kapalné sloučeniny), nebo malé velikosti krystalů. Sloučeniny, které budou experimentálně problematicky lokalizovatelné v mapě elektronové hustoty, budou predikovány v spolupráci s našimi partnery z Karlovy Univerzity metodou molekulových dynamických simulací.

Ve výzkumu nanostrukturálních oxidů přechodných kovů se budeme dále věnovat zejména oxidům ceru, které vykazují výjimečnou spontánní reaktivitu např. vůči fosfoesterům, ale i vůči jiným látkám (např. některým léčivům). Tato reaktivita úzce souvisí s povrchovými vlastnostmi a defektní strukturou CeO₂, na které bychom se chtěli podrobně zaměřit. K tomu by měla výrazně přispět i nová metodika operando (nebo in situ) FTIR, jejíž zavedení na oddělení Materiálové chemie umožní nový FTIR spektrometr ve speciální konfiguraci v rámci plánované investice.

Jako velmi perspektivní směr výzkumu se jeví vývoj nanokompozitních materiálů na bázi CeO₂ v kombinaci s dalšími funkčními komponenty, které vylepšují stávající vlastnosti samotných oxidů. Zaměříme se na využití uhlíkatých nanostruktur (grafen, grafenoxid, nanodiamanty), které jsou buď námi připraveny (např. ultrazvukovou delaminací 2D materiálů) nebo ve spolupráci s našimi partnery z Fyzikálního ústavu AV ČR (např. kompozity s různě modifikovanými nanodiamanty). Nanokompozitní materiály, jejichž funkce závisí na fotoindukovaném přenosu elektronů z barviva do vodivého pásu polovodičových nanočástic (nSC), nabízejí synergické efekty, které kombinují absorpci viditelného světla barvivem s produkcí reaktivních forem kyslíku. Oktaedrické Mo₆ klastry, jejichž studiem se na oddělení Materiálové chemie dlouhodobě zabýváme, jsou pro takové systémy vhodnými fosforescenčními barvivem. Mezi výhody Mo₆ ve srovnání s používanými organickými barvivem patří nižší náchylnost k samozhášení excitovaných stavů při vysokých koncentracích, vysoká fotostabilita a nízká toxicita. Nízké náklady přípravy Mo₆ činí z těchto komplexů

vhodné kandidáty pro citlivé systémy produkující reaktivní formy kyslíku v environmentálních aplikacích. S výhodou lze Mo_6 komplexy také kombinovat s nanočásticemi grafenoxidu nebo polovodičového CeO_2 . Výsledné materiály mohou vykazovat neobyčejné fotofyzikální a fotochemické vlastnosti využitelné v ochraně životního prostředí při odbourávání emergentních a rezistentních polutantů či dosažení antibakteriálních a antivirotických vlastností. Antibakteriální, a přitom netoxické, nanostruktury CeO_2 by tak byly vhodné i pro bioaplikace (např. materiály pro regenerace tkání, nosiče léků, genovou terapii, teranostiku), což je směr, kterým bychom se chtěli vydat. Vylepšené fotokatalytické a fotoinaktivační vlastnosti jsou vhodné pro uhlíkově neutrální sanaci vody.

Budeme pokračovat ve studiu dielektrických, magnetických a magnetoelektrických vlastností hexagonálních feritů strukturních typů X, Y a U ve formě orientovaných keramik a vrstev s cílem nalezení vztahu mezi projevy reálné struktury (textura, orientace) a fyzikálními vlastnostmi. V centru zájmu budou také transportní, magnetické a termoelektrické vlastnosti tenkých vrstev vrstevnatých polovodičů $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dopovaných přechodnými kovy Ni, Co a Fe.

Zaměříme se rovněž na stanovení katalytických vlastností podvojných vrstevnatých alkoxidů modifikovaných iontovými kapalinami pro polymerizaci s otevřením kruhu (epoxidů). Výzkum bude pokračovat i v oblasti heterogenních katalyzátorů s cílem přípravy takových katalyzátorů, které by bylo možno recyklovat.

Budeme pokračovat ve studiu nanostruktur TiO_2 modifikovaných Fentonovými aktivními prvky pro kombinovanou fotokatalytickou/Fentonovu degradaci mikroplastů a optimalizaci růstu nanotrubiček TiO_2 bez obsahu fluoridu pomocí techniky elektrochemické anodizace pro degradaci organických znečišťujících látek.

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

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

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

Bude pokračovat spolupráce na Projektu *Vortex4Fusion* (V4F), podpořeném grantem EU Pathfinders. Hlavní pozornost bude věnována pochopení elektronové excitace různých pevných materiálů na základě hydridů boru pomocí polarizovaného světla. Zde bude zejména zkoumán vztah makromolekulární struktury v pevné fázi na absorpci a emisi světla. Dále bude posouzen vliv poměru B:H na výtěžek částic alfa z fúzních reakcí protonu a boru pomocí řady různých terčů na bázi hydridů boru. Pomocí analýzy vysokoenergetické laserové interakce s řadou chlorovaných derivátů makropolyedráního klastru $\text{B}_{18}\text{H}_{22}$ budou určeny klíčové charakteristiky protonově-borové plasmy.

V oblasti materiálové chemie bude probíhat syntéza bifunkčních derivátů karboranů s SH skupinou pro jejich ukotvení na rovných površích kovových filmů a studium vlastností v samo-organizovaných monovrstvách. Tyto 2D materiály budou následně

využity k vázání kovových iontů koordinační vazbou k povrchu a studium stability ligandového obalu exponovaného vnějšímu prostředí.

V oblasti materiálů se dále budeme věnovat přípravě a charakterizaci přesně definovaných hybridních kovových klastrů s karboranovým klastrovým obalem a studium jejich fotofyzikálních vlastností. Zaměříme se především na stříbrné a měděné klastry, jejich strukturní analýzu, depozici v tenkých vrstvách a vliv interakce s prostředím na změny luminiscenčního chování.

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

Budeme pokračovat ve studiu chiralit borových klastrových sloučenin, metod pro separaci enantiomerů a stereoselektivních reakcí na skeletech neutrálních látek i aniontů. Studium bude zaměřeno i na vliv chiralit na biologické vlastnosti aktivních sloučenin a další možné aplikace chirálních molekul.

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

Ve spolupráci se skupinou z Constructor Univ. Bremen, SRN bude dále pokračovat fyzikálně-chemické studium interakcí objemných klastrových borátových aniontů v roztoku, schopnosti těchto látek přenášet vybrané proteiny přes buněčnou membránu do buňky a sledování jejich distribuce v buněčných organelách.

V oboru environmentální geochemie budou pokračovat výzkumné aktivity zaměřené na zvýšené obsahy manganu a zinku v listech stromů v horských lesích, a to především v souvislosti s poškozením půd kyselými dešti a imisemi z metalurgie a dopravy. Bude pokračovat geochemické mapování kontaminace půd vybraných území ústeckého kraje i samotného města Ústí nad Labem. V rámci této práce se budou využívat nové geostatistické metody. Bude se také ověřovat, do jaké míry je při analýze kontaminace půd možné využívat principy, vyvinuté v předchozích letech při analýze kontaminace nivních sedimentů. Ve spolupráci s PŘF Univerzity Palackého v Olomouci bude pokračovat vývoj nových metod statistické analýzy geochemických dat.

S využitím pokročilých instrumentálních metod (LA-ICP-MS, SEM-EDS/WDS, EPMA, μRS , μXRPD aj.) bude pokračovat provenienční analýza výtvarného umění zaměřená v rámci běžícího projektu na období začátku novověku. Ve spolupráci s partnery v Německu a na Slovensku bude dokončen výzkum pigmentových smaltů ve vztahu k těžbě kobaltových a stříbrných rud v oblasti Krušnohoří, a také azuritů, kde budou podrobněji zmapovány lokality v Rakousku, Maďarsku a na Slovensku. Budou dále probíhat i experimenty zaměřené na historickou výrobu zelené barvy s obsahem síranů a uhličitánů měďnatých. Jejich součástí bude sledování různých faktorů ovlivňujících složení a barevnost, např. obsah CO_2 v roztoku. Výzkum se dále zaměří na surovinové zdroje pozdně gotických polimentů pod zlacení a dosud nepopsané využití bauxitů z oblasti Istrie pro tento účel již v 16. století. Hlavním tématem experimentálního studia degradačních procesů budou interakce pojiv obsahujících mastnou složku (oleje, tempéry, emulze) s pigmenty rtuti a olova, a to i ve vzájemné kombinaci těchto pigmentů. Bude optimalizována metodika na

stanovení volných mastných kyselin a reaktivních těkavých složek (např. formaldehydu a kyseliny mravenčí) v pojivech pomocí chromatografických a spektroskopických metod a bude sledován profil těchto složek v modelových vrstvách vystavených různým podmínkám (teplota, relativní vlhkost, světlo). Vybrané modelové vzorky budou studovány i pomocí synchrotronové difrakce v rámci Historical Materials BAG.

V oblasti aplikované anorganické chemie budeme pokračovat ve vývoji:

(i) pokročilých konstrukčních materiálů pro jaderný průmysl:

- pokročilých konstrukčních materiálů na geopolymerní bázi pro jaderný průmysl se stínícími vlastnostmi,
- nízkoalkalických konstrukčních materiálů (betonů) pro úložiště s odolností vůči bentonitovým suspenzím,
- obalových souborů pro jaderné odpady.

(ii) systémů pro reakční a suspenzní anorganický 3D tisk:

- nového systému anorganického 3D tisku na bázi laserového sintrování anorganických materiálů.

(iii) ekologických a žárovzdorných pojivových systémů z odpadních surovin jako náhrady cementových pojiv:

- ekologických a žárovzdorných pojivových systémů z odpadních surovin pro celkové nebo částečné náhrady cementových pojiv za účelem zpracování dalších odpadních surovin,
- nových ekologických pojiv pro nevhodné a nezpracovatelné písky saharského typu.

(iv) ekologických řešení:

- vývoj a testování nových prostředků s obsahem nanoCu, které by na úrovni EU řešily problematiku totálního zákazu (od 2025) používání měďnatých látek pro ochranu rostlin (víno, chmel a obecně sazenice) proti jejich napadení houbovými chorobami.

(v) sorbentů a fotokatalyzátorů pro dekontaminaci prostředí:

- TiO₂ sorbentů pro odstranění selenu v pitné vodě,
- sorbentů pro odstranění těžkých kovů (např. manganu) a radionuklidů (např. jodu) v odpadních vodách z jaderných elektráren),
- technologie výroby plovoucích fotokatalyzátorů se synergickou adsorpční schopností na bázi napěněné sklo – fotoaktivní kompozit vodní sklo/TiO₂ a jeho aplikace pro mineralizaci organických polutantů,
- materiálů na bázi železa, titanu, či céru, připravených ve větších množstvích a optimalizovaných pro dané skupiny kontaminantů.

VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí:

Pracovníci ústavu se dlouhodobě podílejí na vývoji technologických procesů zaměřených na řešení problému nakládání s vysoce aktivním jaderným odpadem, který vzniká při zpracování vyhořelých jaderných paliv. Optimálním řešením se zdá přepracování paliva v uzavřeném cyklu, který by vedl k důsledné a rychlé eliminaci nejvíce radiotoxických štěpných produktů (minoritních aktinoidů, především Am), výrazně (až tisíckrát s ohledem na dobu nezbytného uložení a šedesátkrát z hlediska

objemu) snížil objem radioaktivních odpadů ukládaných v povrchových i hlubinných úložištích. Dlouhodobě se podílíme na vývoji metod separace minoritních aktinoidů za použití řady vybraných činidel, pochopení stability ligandů, komplexů a rozpouštědel přítomných v systému vůči ionizujícímu záření a hlediska spojená s vývojem procesu a jeho bezpečností.

V době, kdy je potřeba diverzifikovat naše energetické zdroje stále naléhavější, je jaderná fúze zavedeným a slibným kandidátem jako výkonný zdroj bezuhlíkové, čisté a bezpečné energie. Společným konceptem budoucích fúzních elektráren je fúze deuteria a tritia paliva. Tato konkrétní fúzní reakce byla upřednostňována díky svému relativně velkému účinnému průřezu při nízkých teplotách plazmatu. Během této reakce je však velká část uvolněné užitečné energie ve formě energetických neutronů, které mohou potenciálně aktivovat komoru fúzního reaktoru a jeho nejbližší okolí. Toto představuje značné technické překážky, které je třeba překonat, a bezpečnostními problémy, které je třeba vyřešit. Existuje však alternativa k fúzi deuterium-tritium, která v posledních letech získává na popularitě – aneutronické fúzní reakce. Tato skupina reakcí představuje čistý a bezpečný zdroj energie bez produkce radioaktivního ionizujícího záření. Mezi těmito aneutronickými reakcemi se nejslibnějším kandidátem jeví fúze protonů s atomy bóru vzhledem k relativní dostupnosti boru jako paliva a snadné manipulaci s ním. To vedlo v posledním desetiletí k řadě významných studií a ke vzniku soukromých podniků, které chtějí tuto technologii využít (např. HB11 energy, australská společnost). Mezi hlavní nevyřešené otázky, které v současné době brání efektivnímu využití fúze patří (i) pochopení požadavků na laser nezbytný k vytvoření a udržení inerciálního zadržení paliva a zapálení reakce a (ii) lepší pochopení toho, co je vlastně ideální palivo. Náš interdisciplinární projekt je snahou odpovědět na tyto dvě otázky a snaží se prozkoumat a případně ověřit použití molekulárních borových hydridů (boranů) jako ideálního paliva pro fúzi. Tento projekt spojuje odborné znalosti ze dvou českých vědeckých institucí a několika ze zahraničí a vytváří synergický a symbiotický most mezi anorganickou chemií (Ústav anorganické chemie) a fyzikou plazmatu (Ústav fyziky plazmatu), aby se stal průkopníkem studia zcela nového typu fúzního cíle založeného na komplexních molekulách boranového klastru.

V mezinárodním projektu GreenWaterTech (Horizon 2020 Co-funds) se intenzivně zabýváme vývojem adsorbentů a fotokatalyzátorů na bázi oxidů kovů. Ve spolupráci s kolegy ze Švédska (Uppsala University, Swedish University of Agricultural Sciences) a Francie (Ecole Normale Supérieure de Lyon, CNRS Lyon) a několika firmami vyvíjíme relativně levné metody přípravy funkčních nanomateriálů pro odstraňování a bezpečný rozklad polutantů nacházející se ve vodách, se zaměřením na tzv. polutanty vzbuzující obavy (CEC – contaminants of emerging concerns). Jedná se např. o pesticidy, rezidua léčiv, endokrinní disruptory a biopolutanty (viry, bakterie, ARGs). Ve spolupráci s UJEP se nově zabýváme studiem toxicity námi vyvinutých nanomateriálů pro různé typy organizmů (buňky, bakterie, řasy, ryby), abychom mohli posoudit a zdokumentovat dopady použití nanomateriálů na životní prostředí.

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

ekologické olympiády středoškolských studentů Ústeckého kraje.

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

Po přijetí evropského projektu "Zelená dohoda pro Evropu" se zásadně změnil dosud neurčitý přístup některých cementáren v České republice k emisím CO₂ a cementárny se samy začínají iniciativně zajímat o případné náhrady portlandského cementu. V současnosti je uzavřena licenční dohoda na způsob výroby "geopolymerně pucolánových ekologických betonů". ÚACH se snaží v rámci svých možností přispět ke splnění závazků ČR při snižování emisí skleníkových plynů. Také se intenzivně věnujeme zpracování odpadních surovin (např. popílky a strusky) s cílem maximálně nahradit ekologicky náročné portlandské cementy.

Podílíme se rovněž na dalším vývoji a optimalizaci vlastností kompozitního fotokatalytického materiálu na bázi SiO₂-TiO₂, který pod názvem Balclean zařadila do vyráběného sortimentu firma BARVY A LAKY TELURIA, s.r.o. Materiál je v současné době používán pro zamezení růstu řas a samočisticí úpravu povrchu zateplených panelových domů. Na toto úspěšné téma plynule navázal další projekt zabývající se fotoaktivními nanokompozitními systémy pro zlepšení životního prostředí se zaměřením na ošetření historických objektů, který je opět řešen ve spolupráci s firmou BARVY A LAKY TELURIA, s.r.o., dále s firmou PRAGOTHERM, servis fasád s.r.o. a několika dalšími vědeckými institucemi.

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

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

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

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

IX. Aktivity v oblasti pracovněprávních vztahů: *)

Základní personální údaje:

k 31. 12. 2023 bylo v ústavu zaměstnáno 78 fyzických osob (FO).

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

Struktura zaměstnaných osob ústavu

Počet zaměstnaných osob (FTE)		celkem	z toho muži	z toho ženy
			67,85	36,75
v tom	na pozicích ve výzkumných týmech	54,55	34,25	20,3
	na pozicích v administrativě	8,6	0	8,6
	na dalších pozicích	4,7	2,5	2,2

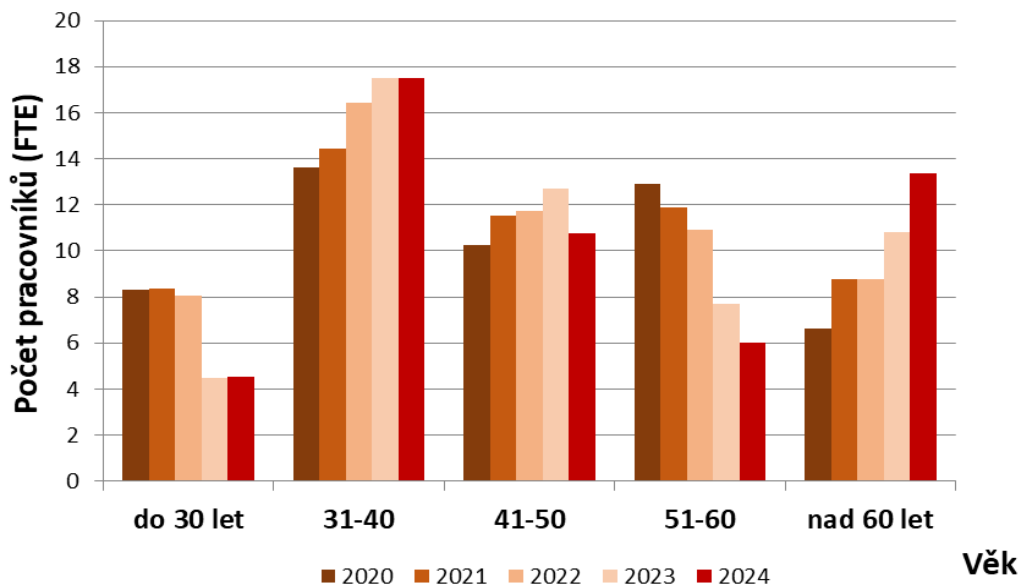
Z uvedené tabulky vyplývá, že cca 78 % pracovní kapacity zaměstnaných ústavu tvořili pracující ve výzkumných týmech. Z toho (FTE) mělo 93 % ukončené VŠ vzdělání, z nich bylo 76 % vědeckých pracovníků/pracovnic (získali Ph.D. titul nebo jeho ekvivalent) a 10 % studentů/studentek doktorského studia.

V roce 2023 pracovní poměr ukončilo 9 pracujících. Bylo přijato 11 pracujících, z toho bylo 8 zařazeno do výzkumných týmů, z nich 2 doktorandi/doktorandky a 4 postdoktorandi/postdoktorandaky. Při přijímání nových pracovníků a pracovnic je kladen důraz především na jejich odbornost, vědeckou úroveň a perspektivu.

Vedení ústavu věnuje setrvalou pozornost studentům/studentkám doktorského i pregraduálního studia, jejichž práce probíhá pod supervizí ústavních školitelů a školitelek. Studenti/studentky spolupracují při řešení výzkumných projektů a aktivně se účastní prezentace výsledků včetně účasti na mezinárodních konferencích. Po úspěšné obhajobě diplomové nebo disertační práce mají ti nejschopnější možnost zahájit vlastní vědeckou kariéru v ústavu.

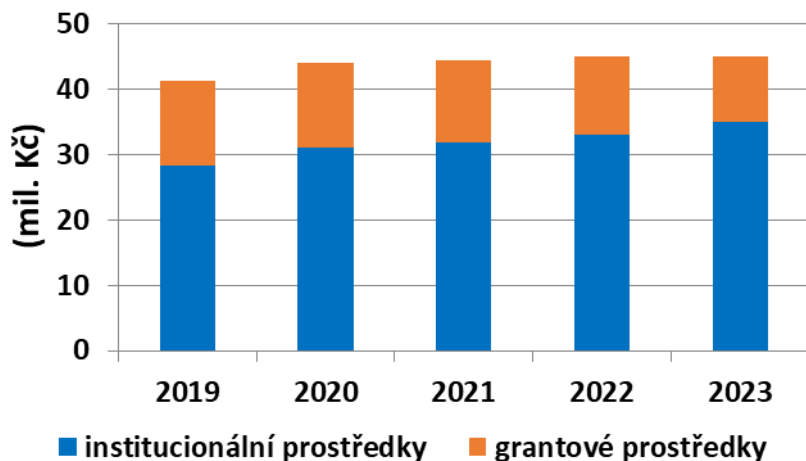
Věková struktura výzkumných pracovníků a pracovnic ústavu je příznivá. V následujícím obrázku je zobrazen vývoj věkové struktury výzkumných pracovníků/pracovnic v letech 2020–2023 s výhledem na r. 2024. Počet fyzických osob v nejnižších věkových kategoriích je ve skutečnosti výrazně vyšší, protože významný podíl těchto pracovníků tvoří studenti a maminky po návratu z mateřské nebo rodičovské dovolené, pracující na částečný úvazek. Průměrný věk pracovníků a pracovnic ve vědeckých útvarech v r. 2023 byl srovnatelný s předchozím rokem – 47 let.

**Vývoj věkové struktury ve vědeckých týmech
2020-2024**



Mzdové prostředky z dotace zřizovatele v r. 2023 činily cca 77 % z celkem vyplacených mzdových prostředků. Průměrná mzda byla ve výši 56 155 Kč.

Struktura mzdových prostředků 2019-2023



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

X. Aktivity v oblasti rovných příležitostí

Zavazujeme se podporovat rovnost žen a mužů v rámci akademické obce, bojovat s genderovými předsudky a vytvářet pracovní prostředí s rovnými podmínkami práce a kariérního růstu jak pro ženy, tak pro muže. Pracovní skupina pro rovnost žen a mužů, od února 2023 ve složení Ing. Petra Ecorchard Ph.D., Ing. Kamil Lang, CSc., Ing. Silvie Švarcová, Ph.D. a RNDr. Karel Škoch, Ph.D. aktualizovala Plán rovnosti žen a mužů Ústavu anorganické chemie AV ČR, který byl rozšířen o návrhy konkrétních opatření pro zlepšení pracovního prostředí, reflektující závěry a doporučení genderového auditu provedeného v ÚACH v roce 2022 v těchto klíčových oblastech:

- i) sladování osobního a pracovního života a organizační struktura,
- ii) rovnováha ve vedení a rozhodování,
- iii) genderová rovnost při náboru a kariérním postupu,
- iv) opatření proti sexuálnímu obtěžování a genderově podmíněnému násilí.

Dokument je přístupný na webových stránkách ústavu (<https://www.iic.cas.cz/wp-content/uploads/2023/06/Plan-rovnosti-zen-a-muzu-UACH-AV-CR.pdf>) a je uveden také v anglické verzi.

Od února 2023 zastává pozici ombudsmana RNDr. Karel Škoch, Ph.D., na pozici ombudsmanky je i nadále Ing. Petra Ecorchard Ph.D. Ve spolupráci s ÚJF AV ČR a ÚOCHB AV ČR, proběhlo v ÚACH dvoudenní školení ombudsoob a kontaktních osob pro nahlásování případů obtěžování a šikany. Školení od společnosti Konsent poskytlo úvod do témat sexuálního a genderově podmíněného obtěžování a šikany, informace o zásadách jednání s oběťmi těchto jevů i s lidmi v mezní situaci, seznámení s principy mediace a s dopady nevhodného chování na oběť, kolektiv i instituci. Výstupy ze školení budou použity pro tvorbu metodiky pro řešení případů sexuálního obtěžování a nevhodného sociálního chování.

2.5.2023 proběhlo prezenční školení (workshop), zajištěné lektorkami ze Sociologického ústavu AV ČR, ke zvýšení povědomí o problematice genderové rovnosti, kterého se účastnilo 38 pracujících z ÚACH. Další 10 osob využilo možnost online školení v anglickém jazyce (20.6.2023).

Byl aktualizován Volební řád ÚACH tak, aby členy a členkami shromáždění výzkumných pracovníků byli i rodiče dětí do věku 3 let, kteří mají snížený pracovní úvazek pod 50%, pokud při nástupu na mateřskou/rodičovskou dovolenou splňovali kritéria pro členství v shromáždění výzkumných pracovníků/pracovnic.

Na podzim 2023 se ÚACH zapojil do prevalenční národní studie Sociologického ústavu AV ČR, týkající se genderově podmíněného násilí v akademickém prostředí. Účast v průzkumu byla pro pracujících a studujících v ÚACH dobrovolná.

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

V souladu s přijatým Plánem rovnosti žen a mužů ÚACH ve své výroční zprávě uveřejňuje agregovaná statistická data o pracujících a studujících podle pohlaví, tj. zastoupení mužů a žen ve vedoucích pozicích, na rozhodovacích pozicích a v orgánech ústavu, v jednotlivých odděleních a zaměstnaneckých kategoriích, podíl mužů a žen na podávání a získávání grantových návrhů a statistiku mužů a žen nastupujících/opouštějících.

Kvalifikační stupeň/pozice	Muži/Ženy
Odborný pracovník/odborná pracovnice VaV	3/4
Doktorand/doktorandka	3/3
Postdoktorand/postdoktorandka	8/9
Vědecký asistent/vědecká asistentka	2/1
Vědecký pracovník/vědecká pracovnice	11/4
Vedoucí vědecký pracovník/vedoucí vědecká pracovnice	8/1
Ostatní pracovníci/pracovnice	4/17
Zastoupení mužů a žen v Radě ústavu	8/4
Zastoupení mužů a žen v Dozorčí radě	4/0
Zastoupení mužů a žen ve vedoucích pozicích:	9/4
<i>Vedení ústavu (ředitel/ředitelka, zástupci/zástupkyně)</i>	3/0
<i>Dozorčí rada (předseda/předsedkyně, místopředseda/místopředsedkyně)</i>	2/0
<i>Rada ústavu (předseda/předsedkyně, místopředseda/místopředsedkyně)</i>	0/2
<i>Vedoucí oddělení</i>	4/2
Zastoupení mužů a žen, navázání pracovního poměru	3/8
Zastoupení mužů a žen, ukončení pracovního poměru	2/7
Zastoupení mužů a žen při podávání grantových návrhů	17/5
Zastoupení mužů a žen při získávání grantových návrhů	5/2



Výroční zpráva o poskytování informací za rok 2023

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

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

1. Počet podaných žádostí o informace

3

2. Počet vydaných rozhodnutí o odmítnutí žádosti

0

3. Počet podaných odvolání proti rozhodnutí

0

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

Nebyl vydán žádný rozsudek soudu.

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

Nebylo vedeno žádné sankční řízení

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

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

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

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

Nebyla podána žádná stížnost.

8. Další informace vztahující se k uplatňování tohoto zákona

0

Výroční zpráva ÚACH o poskytování informací podle zákona je začleněna do Výroční zprávy o činnosti a hospodaření ÚACH za rok 2023 jako její samostatná část s názvem „Poskytování informací podle zákona č. 106/1999 Sb. o svobodném přístupu k informacím“.

8. února 2024



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



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

Přílohou výroční zprávy je účetní závěrka a zpráva o jejím auditu