

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

IČ: 61388980

Sídlo: Husinec-Řež, č.p. 1001, 250 68

## **Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2007**

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 29. května 2008

Radou pracoviště schválena dne: 27. května 2008

V Řeži dne 30. května 2008

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

### a) Výchozí složení orgánů pracoviště

Pověřen vedením od 1. 1. 2007: **Ing. Jana Bludská, CSc.**

Ředitel pracoviště: **Ing. Jana Bludská, CSc.**

jmenován s účinností od : **1. 6. 2007**

Rada pracoviště zvolena dne 18. 1. 2007 ve složení:

předseda: **Ing. Jana Bludská, CSc.**

místopředseda: **Ing. Zbyněk Černý, CSc.**

členové:

RNDr. Bohumír Grüner, CSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

Ing. Ivo Jakubec, CSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

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

Michael Londesborough, PhD., ÚACH AV ČR, v. v. i.

Prof. Ing. Lubomír Němec, DrSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

Ing. Jan Šubrt, CSc., ÚACH AV ČR, v. v. i.

Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, FChT VŠCHT Praha

doc. RNDr. Zdeněk Mička, CSc., PřF UK v Praze

Prof. RNDr. Jiří Pinkas, PhD., PřF MU v Brně

Prof. Ing. Ladislav Tichý, DrSc., SLChPL ÚMCH a Univerzity Pardubice

Dozorčí rada jmenována dne 27. 3. 2007 ve složení:

předseda: Ing. Blanka Wichterová, DrSc., Dr.h.c., ÚFCH J.H. AV ČR, v. v. i.

místopředseda: doc. Ing. Zbyněk Plzák, CSc.

členové:

prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc., ÚCHP AV ČR, v. v. i.

prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc., FChT VŠCHT Praha

prof. Ing. Petr Mikulášek, PhD, FChT Univerzita Pardubice

## **b) Změny ve složení orgánů:**

V průběhu r. 2007 nebyly provedeny žádné změny.

## **c) Informace o činnosti orgánů:**

Ředitel:

V průběhu r. 2007 bylo vydáno 9 interních předpisů k zajištění činnosti ústavu jako veřejné výzkumné instituce (dále jen v. v. i.). Byly provedeny reatestace odborných a vědeckých pracovníků a individuálně stanoveny mzdy pracovníků ústavu. V závěru roku byla vyhodnocena a oceněna publikační aktivita pracovníků. Byla rovněž provedena analýza věkové struktury pracovníků ústavu, posouzeno personální zabezpečení řešení jednotlivých výzkumných úkolů a přijmuta příslušná opatření pro r. 2008.

Po provedení převodu nemovitého majetku do vlastnictví ústavu (k 1. 1. 2007) byly uzavřeny dvě smlouvy s ÚJF AV ČR, v. v. i. o bezúplatném užívání nebytových prostor a jedna smlouva s ÚSMH AV ČR, v. v. i. o pronájmu nebytových prostor.

V rámci rekonstrukce budovy FIII bylo vybudováno moderní středisko vědeckých informací, kde je soustředěn knihovní fond ústavu a studovna s možností připojení k databázím. Dále byla provedena nákladná oprava spočívající v izolaci téže budovy proti prosakování a rozsáhlá rekonstrukce digestoří v budově FII. Byl vypracován rámcový výhled akcí investiční výstavby, rekonstrukcí, údržby a oprav budov ústavu pro roky 2008-2010, zahrnující v r. 2008 kompletní výměnu oken v budově FII.

Přístrojové vybavení ústavu bylo v r. 2007 rozšířeno o kapalinový chromatografický systém s hmotnostním detektorem typu iontové pastí, který bude využívám především při studiu vlastností boranových klastrů a o hmotnostní spektrometr, určený k identifikaci produktů fotokatalytického rozkladu v plynné fázi.

V r. 2007 byly uzavřeny smlouvy na řešení 43 projektů VaV převážně v programech MŠMT, MPO, GA ČR a GA AV ČR. Účelové prostředky plynoucí z podpory zmíněných poskytovatelů do rozpočtu představovaly cca 40% provozních nákladů ústavu.

Ústav se aktivně podílel na přípravě podkladů pro akreditace 4letých DSP v rámci spolupráci s VŠCHT Praha, PŘF UK a Univerzitou Pardubice.

Uzavřením dvou licenčních smluv byla završena spolupráce ústavu a firmy Rokospol, a.s. na projektu VaV technologie výroby fotokatalyticky aktivních pigmentů. Projekt byl řešen za finanční spoluúčasti partnera, který získal exkluzivní práva využití výsledků za podmínek daných těmito smlouvami.

Rada pracoviště:

V r. 2007 se uskutečnilo 7 jednání Rady ÚACH AV ČR, v. v. i.:

1. jednání - 24. ledna 2007

Rada především projednala a schválila návrh Jednacího řádu Rady (Interní předpis č. 62), tajnou volbou zvolila předsedkyni a místopředsedu Rady, souhlasila s návrhem na jmenování tajemníka Rady, schválila výroční zprávu ústavu za r. 2006, projednala a schválila Organizační řád ústavu a Kariérní řád ústavu (IP č. 63 a 64), rozhodla se bez prodlení vyhlásit výběrové řízení na obsazení funkce ředitele ústavu a jmenovala výběrovou komisi pro toto řízení.

2. jednání - 3. dubna 2007

Rada projednala výsledek výběrového řízení na obsazení funkce ředitele ústavu a na základě doporučení výběrové komise navrhla zřizovateli jmenovat J. Bludskou do funkce ředitelky ústavu. Rada dále projednala a schválila rozpočet ústavu na r. 2007 a Mzdový předpis (IP č. 65).

3. jednání - 28. - 31. května 2007 (per rollam)

Rada projednala a schválila Pravidla pro hospodaření s fondy a Spisový a skartační řád (IP č.66 a 67), seznámila se se Směrnicí o využití prostředků Sociálního fondu a byla informována o jmenování Dozorčí rady ústavu.

4. jednání - 20. června 2007

Rada se seznámila s projektem Centra elektronové mikroskopie pro materiálový výzkum a doporučila účast ústavu v soutěži programu OP VaVpl. Rada se dále zabývala rámcovým výhledem stavebních akcí na období 2008 - 2010.

5. jednání - 27.7. - 31.7. 2007 (per rollam)

Rada zvážila a doporučila účast ústavu v zájmovém sdružení Institut aplikovaných věd.

6. jednání - 31. října 2007

Rada byla informována o přípravě projektů do soutěže programu OP VaVpl (projekt ÚACH Centrum elektronové mikroskopie pro materiálový výzkum, projekt zájmového sdružení Institut aplikovaných věd, projekt Univerzity Pardubice a AV Centrum materiálového výzkumu). Rada se zabývala vedením studia ve společných akreditacích DSP s VŠCHT Praha, PŘF UK v Praze a Univerzitou Pardubice.

7. jednání - 10. - 12. prosince 2007 (per rollam)

Rada ÚACH doporučila 6 pracovníků ústavu k udělení statutu emeritní pracovník jako uznání za zásluhy ve vědecké práci a při rozvoji ústavu.

Dozorčí rada:

V r. 2007 se uskutečnila 2 jednání Dozorčí rady ústavu:

1. jednání - 4. června 2007

DR se seznámila se zněním návrhů dvou smluv o bezplatném užívání nebytových prostor s ÚJF AV ČR, v. v. i. a neshledala problém pro uzavření těchto smluv po obdržení souhlasu právního odboru AV. DR byla seznámena s návrhem financování provozu Laboratoře anorganických materiálů, společného pracoviště ÚACH a VŠCHT. DR doporučila připravit třístrannou smlouvu mezi ÚSMH AV ČR v. v. i., ÚACH a VŠCHT zabezpečující provoz pracoviště a tuto projednat a odsouhlasit právním odborem AV ČR. DR diskutovala návrh ÚJV, a.s. na odkoupení nebytových prostor nebo zřízení věcného břemene na jimi využívané místnosti v F II areálu Řež, nedoporučila je a navrhla uzavření dlouhodobé nájemní smlouvy s ÚJV.

2. jednání - 28. 11. 2007

DR projednala návrh smlouvy o nájmu nebytových prostor mezi ÚSMH AV ČR, v. v. i. a ÚACH (část přízemí budovy A ÚSMH AV ČR, v. v. i.) a vyslovila předchozí souhlas s podepsáním této smlouvy s platností od 1. 1. 2008.

## **II. Informace o změnách zřizovací listiny:**

*V průběhu r. 2007 nebyly provedeny žádné změny.*

## **III. Hodnocení hlavní činnosti:**

### **1. Vědecká činnost ústavu a uplatnění jejích výsledků**

#### **1a) Stručná charakteristika vědecké činnosti**

Příprava a charakterizace nanostrukturních a nanokompozitních materiálů na bázi oxidů a sulfidů kovů; aplikace poznatků v oblasti environmentální fotokatalýzy a při detoxikaci bojových chemických látek; příprava a charakterizace tenkých vrstev dielektrik, magnetik a termoelektrik na bázi oxidů kovů; studium vzniku fází v uvedených systémech; příprava a charakterizace materiálů na bázi kaolinu a oxidů kovů; příprava a charakterizace nových heteroboranů, karboranů, jejich derivátů a komplexů s přechodnými kovy; cílený vývoj reaktivních strukturních boranových bloků; syntéza biologicky aktivních boranových klastrů s využitím jako virostatika; syntéza nové generace činitelů pro selektivní extrakci radionuklidů z jaderných odpadů; příprava a charakterizace vysoce čistých chalkogenidových a HMO skel pro optoelektronické aplikace; interkalace kovových iontů do tetradymitových monokrystalů; studium samoorganizovaných a supramolekulárních systémů, fotochemických procesů a reaktivních kyslíkových částic; popis mechanismů a kinetiky procesů při tavení skel se zaměřením na jejich pokročilé

přípravy; analýza pevných fází (strukturní, mineralogická, elektrochemická); vývoj metodiky vysokoteplotní rtg práškové difrakce k analýze expandabilních interkalovaných jílových minerálů; materiálový průzkum malířských děl.

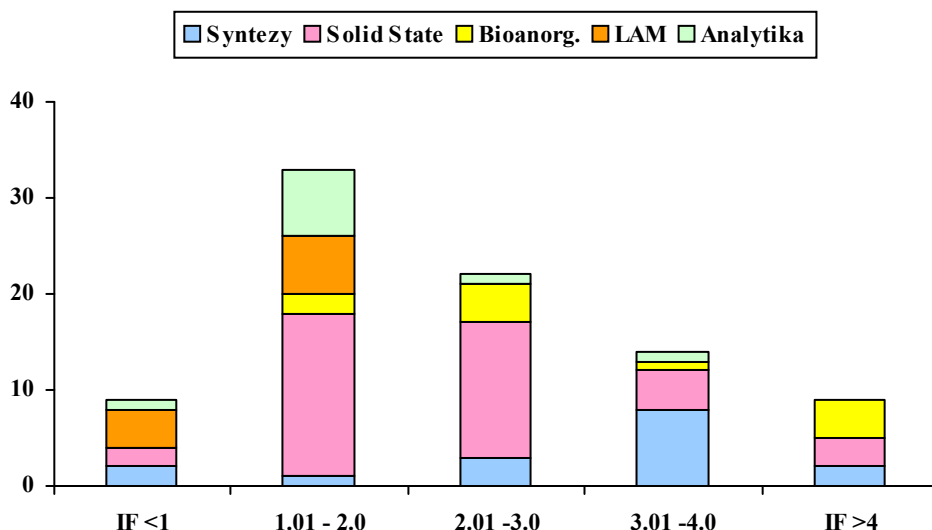
### 1b) Výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti a jejich aplikací

Nejvýznamnější výsledky byly v r. 2007 získány především v oblastech:

- materiálové chemie (nanostrukturní oxidy a sulfidy kovů pro fotokatalýzu a destrukci bojových látek, mikročástice ušlechtilých kovů a oxidů kovů s definovanou morfologií, fotofunkční anorganické a polymerní materiály obsahující porfyrinové senzitivátory, alumosilikátové a jílové sorbety laděné železitými ionty)
- chemie boranových klastrů (nové členy série heterokarbaboranů, heterometallaboranů a karbametallaboranů, thia- a azaderiváty karboranů, klastrové metallaborany jako inhibitory HIV proteázy)
- tradiční problematiky ústavu – zpracování odpadních kamenců vznikajících při sanaci území, kde probíhala podzemní těžba uranu. Patentovaným výsledkem je způsob zpracování epitaxním růstem vedoucí k čistým formám  $Al(OH)_3$ , které jsou vhodné pro další materiálovou chemii.

Poznatky byly publikovány v 87 pracích v mezinárodních časopisech, jejichž IF výrazně převyšuje medián v oboru, prezentovány v 64 příspěvcích na mezinárodních konferencích a staly se předmětem 2 udělených patentů, 4 patentových přihlášek a 4 licenčních smluv. Dvě z těchto smluv byly uzavřeny ke komerčnímu využití know-how na výrobu fotokatalytických pigmentů na bázi  $TiO_2$ . V březnu 2008 uživatel licence ohlásil zahájení výroby samočisticích nátěrových hmot s tímto aditivem (jako první producent v ČR).

Publikační výstup ÚACH 2007 s ohledem na IF



Mediány IF oborů 2006: Anorganická chemie – 1.402  
Materiálové vědy – 0.983  
Nanovědy, nanotechnologie – 1.543

Výsledky s uvedením vybraných citací:

(1) Byly syntetizovány fotokatalyzátory na bázi  $\text{TiO}_2$  včetně dopovaných materiálů se zvýšenou citlivostí ve viditelné oblasti spektra. Vlastnosti materiálů byly optimalizovány i z hlediska aplikací v transparentních nátěrech (nanočástice jednotného tvaru s úzkou distribucí rozměrů) a pro použití v čistíčkách vzduchu (vláknitá morfologie částic). Byl vyvinut nový způsob výroby fotokatalytických pigmentů na bázi  $\text{TiO}_2$  a kaolinitu.

Bakardjieva, S., Štengl, V., Šubrt, J., Houšková, V., Kalenda, P.: Photocatalytic efficiency of iron oxides: Degradation of 4-chlorophenol. - J. Phys. Chem. Solids 68, 5-6: 721-724 (2007);  
Balek, V., Li, D., Šubrt, J., Večerníková, E., Hishita, S., Mitsuhashi, T., Haneda, H.: Characterization of nitrogen and fluorine co-doped titania photocatalyst: Effect of temperature on microstructure and surface activity properties. - J. Phys. Chem. Solids 68, 5-6: 770-774 (2007);  
Lukáč, J., Klementová, M., Bezdička, P., Bakardjieva, S., Šubrt, J., Szatmary, L., Bastl, Z., Jirkovský, J.: Influence of Zr as  $\text{TiO}_2$  doping ion on photocatalytic degradation of 4-chlorophenol. - Appl. Catal. B-Environ. 74, 1-2: 83-91 (2007);  
Lukáč, J., Klementová, M., Bezdička, P., Bakardjieva, S., Šubrt, J., Szatmary, L., Grusková, A.: Characterization of Zr-doped  $\text{TiO}_2$  prepared by homogenous co-precipitation without high-temperature treatment. - J. Mater. Sci. 42, 22: 9421-9428 (2007);  
Štengl, V., Bakardjieva, S., Murafa, N., Šubrt, J., Mest'anková, H., Jirkovský, J.: Preparation, characterization and photocatalytic activity of optically transparent titanium dioxide particles. - Mater. Chem. Phys. 105, 1: 38-46 (2007);  
Štengl, V., Bakardjieva, S., Murafa, N., Večerníková, E., Šubrt, J., Balek, V.: Preparation and characterization of titania based nanowires. - J. Nanopart. Res. 9, 3: 455-470 (2007).  
Černý, Z., Macháček, J., Bludská, J., Štengl, V., Havlín, V.: Způsob výroby fotokatalytických pigmentů; PV 2007 – 627.

(2) Byly syntetizovány a charakterizovány nové typy vysoce aktivních nanočásticových materiálů na bázi oxidů a sulfidů kovů, vhodných pro rozklad bojových chemických látek. Byla prostudována struktura těchto materiálů, popsány souvislosti mezi podmínkami přípravy a jejich strukturou; látky byly testovány z hlediska jejich použitelnosti pro rozklad bojových chemických látek s vynikajícími výsledky.

Houšková, V., Štengl, V., Bakardjieva, S., Murafa, N., Kalendová, A., Opluštil, F.: Zinc oxide prepared by homogeneous hydrolysis with thioacetamide, its destruction of warfare agents, and photocatalytic activity. - J. Phys. Chem. A 111, 20: 4215-4221 (2007);  
Houšková, V., Štengl, V., Bakardjieva, S., Murafa, N., Kalendová, A., Opluštil, F.: Nanostructure materials for destruction of warfare agents and eco-toxins prepared by homogeneous hydrolysis with thioacetamide: Part 1 - zinc oxide. - J. Phys. Chem. Solids 68, 5-6: 716-720 (2007);  
Daněk, O., Štengl, V., Bakardjieva, S., Murafa, N., Kalendová, A., Opluštil, F.: Nanodispersive mixed oxides for destruction of warfare agents prepared by homogeneous hydrolysis with urea. - J. Phys. Chem. Solids 68, 5-6: 707-711 (2007).

(3) Thiolové deriváty o-karboranu, klastrové sloučeniny s vysokým inherentním dipólem, byly úspěšně použity k povrchovým modifikacím zlatých a stříbrných krystalů ve formě mikromimetických lístečků, drátků apod.. Tyto anorganické molekulární systémy po navázání a uspořádání na zlatém nebo stříbrném povrchu mění vlastnosti transportu elektronů ze substrátu do vnějšího prostředí. Materiály vykazují výjimečné vlastnosti využitelné v elektronice, katalýze nebo metalurgii.

Baše, T.: Gold and silver crystals modified with selected carboranethiol derivatives; World Nanoeconomic Congress, April 23-24, Pretoria, South Africa (2007).  
Baše, T., Šubrt J.: International Patent Application PCT/CZ2007/00064.

(4) Podařilo se připravit vrstevnaté organo-hydrotalcity a polymery s interkalovanými molekulami porfyrinů ve formě prášků, filmů a nanovláken, které

mají výrazné fotosenzitizující vlastnosti. Singletový kyslík, vznikající po ozáření na jejich površích, je predestinuje k přípravě materiálů s baktericidními vlastnostmi aktivovanými světlem.

Lang, K., Bezdička, P., Bourdelande, J. L., Hernando, J., Jirka, I., Káfuňková, E., Kovanda, F., Kubát, P., Mosinger, J., Wagnerová, D. M.: Layered Double Hydroxides with Intercalated Porphyrins as Photofunctional Materials: Subtle Structural Changes Modify Singlet Oxygen Production. - Chem. Mater. 19: 3822-3829 (2007).

Lang K., Kubát P., Mosinger J., Bujdák J., Hof M., Janda P., Sýkora J., Iyi N.: Photoactive Oriented Films of Layered Double Hydroxides.-Phys.Chem.-Chem.Phys., v tisku.

(5) Byly připraveny a charakterizovány nové sorbenty na bázi jílových minerálů modifikovaných oxidy železitými pro sorpci arseničnanů z vodných roztoků. Jsou to kvalifikované materiály určené k ochraně životního prostředí.

Grygar, T., Hradil, D., Bezdička, P., Doušová, B., Čapek, L., Schneeweiss, O.: Fe(III)-modified montmorillonite and bentonite: Synthesis, chemical and UV-vis spectral characterization, arsenic sorption, and catalysis of oxidative dehydrogenation of propane.- Clays Clay Minerals 55: 165-176 (2007).

(6) Bylo vysvětleno magnetické chování nanočástic spinelového feritu  $MgFe_2O_4$  /  $SiO_2$  v závislosti na teplotě, na velikosti částic a na distribuci velikosti částic.

Poltierová, J., Vejpravová, J., Nižňanský, D., Plocek, J., Holec, P. : Magnetic properties of sol-gel fabricated  $MgFe_2O_4$  /  $SiO_2$  nanocomposites.- J. Appl. Phys., v tisku

(7) Na základě experimentálních výsledků byla zformulována představa o vzniku defektních lamel vzniklých při interkalaci mědi do tetradymitového monokrystalu  $Bi_2Te_3$ .

Bludská, J., Jakubec, I., Drašar, Č., Lošťák, P., Horák, J.: Structural defects in Cu-doped  $Bi_2Te_3$  single crystals. – Phil. Mag. 87: 325-335 (2007).

(8) Byl popsán vliv dopování vzácnými zeminami na elektrické, dielektrické a optické vlastnosti chalkogenidových skel.

Kalužný, J., Ležal, D., Pedlíková, J., Zavadil, J., Kubliha, J.: Influence of the Rare Earth on Electric, Dielectric and Optical Properties of  $TeO_2$ - $PbCl_2$ - $PbF_2$  glasses. – Material Science and Technology, 4: 1-7 (2007).

(9) Pomocí elektronové mikroskopie (HRTEM, SEM) byly charakterizovány různé typy pevných látek a materiálů (uhlíkové nanotrubičky, magnetické nanočástice a vrstvy, amorfni uhlík připravený pyrolýzou iniciovanou laserem, kompozity Si-C-chalkogenid) a řada jiných. Metoda umožnila charakterizovat na nanoúrovni jejich strukturu a chemické složení a přispěla tak zásadním způsobem k poznání souvislostí mezi podmínkami jejich vzniku, strukturou a vlastnostmi.

David, B., Pizurová, N., Schneeweiss, O., Bezdička, P., Klementová, M., Filip, J., Alexandrescu, R., Dumitrache, F., Fleaca, C. T., Voicu, I., Morjan, I.: Multi-walled carbon nanotubes formed by condensed-phase conversions of Fe-C-based nanopowder in vacuum. - Czech. J. Phys. 56, E51-E61 (2006);

David, B., Pizurová, N., Schneeweiss, O., Klementová, M., Santava, E., Dumitrache, F., Alexandrescu, R., Morjan, I.: Magnetic properties of nanometric Fe-based particles obtained by laser-driven pyrolysis. - J. Phys. Chem. Solids 68, 5-6: 1152-1156 (2007);

Demel, J., Čejka, J., Bakardjieva, S., Štěpnička, P.: Grafting of palladium nanoparticles onto mesoporous molecular sieve MCM-41: Heterogeneous catalysts for the formation of an N-substituted pyrrol. - J. Mol. Catal. A-Chem. 263, 1-2: 259-265 (2007);

Ettler, V., Johan, Z., Sebek, O., Bezdička, P., Klementová, M.: Mineralogy and alteration of fly ash from secondary Pb metallurgy. - Geochim. Cosmochim. Acta 71, 15: A263-A263 (2007);

Kalbac, M., Frank, O., Kavan, L., Zúkalová, M., Procházka, J., Klementová, M., Dunsch, L.: Heterostructures from single-wall carbon nanotubes and  $TiO_2$  nanocrystals. - J. Electrochem. Soc.

154, 8: K19-K24 (2007);  
 Korshunov, A., Heyrovský, M., Bakardjieva, S., Brabec, L.: Electrolytic processes in various degrees of dispersion. - *Langmuir* 23, 3: 1523-1529 (2007);  
 Ouchi, A., Bastl, Z., Boháček, J., Šubrt, J., Pola, J.: Laser-induced chemical liquid deposition of discontinuous and continuous copper films. - *Surf. Coat. Technol.* 201, 8: 4728-4733 (2007);  
 Pokorná, D., Šubrt, J., Galiková, A., Pola, J.: IR laser ablative and conventional decomposition of poly(vinyl phenyl ketone): Different processes and different products. - *Polym. Degrad. Stabil.* 92, 3: 352-358 (2007);  
 Pola, J., Bakardjieva, S., Maryško, M., Vorlíček, V., Šubrt, J., Bastl, Z., Galikova, A., Ouchi, A.: Laser-induced conversion of silica into nanosized carbon-polyoxocarbosilane composites. - *J. Phys. Chem. C* 111, 45: 16818-16826 (2007);  
 Pola, J., Ouchi, A., Bezdička, P., Boháček, J., Šubrt, J.: Laser co-photolytic approach to copper(I) bromide/polymer nanosol and nanocomposite. - *J. Photochem. Photobiol. A-Chem.* 190, 1: 29-33 (2007);  
 Santos, M., Diaz, L., Urbanová, M., Bastl, Z., Šubrt, J., Pola, J.: IR laser-induced co-decomposition of dimethyl selenide and trisilane: Gas-phase formation of SiSe and chemical vapor deposition of nanostructured H/Si/Se/C polymers. - *J. Photochem. Photobiol. A-Chem.* 188, 2-3: 399-408 (2007);  
 Tomovská, R., Urbanová, M., Šubrt, J., Boháček, J., Pola, J.: UV laser deposition of SiS/poly(thiacarbosilane) composites and their conversion to SiO/poly(thiacarbosiloxane) composites. - *Macromol. Chem. Phys.* 208, 16: 1782-1788 (2007);  
 Usaková, M., Lukáč, J., Dosoudil, R., Jančařík, V., Grusková, A., Usak, E., Sláma, J., Šubrt, J.: Influence of Cu<sup>2+</sup> ions on structural and magnetic properties of NiZn ferrites. - *J. Mater. Sci.-Mater. Electron.* 18, 12: 1183-1189 (2007);  
 Veverka, M., Veverka, P., Kaman, O., Lancok, A., Zaveta, K., Pollert, E., Knizek, K., Bohacek, J., Benes, M., Kaspar, P., Duguet, E., Vasseur, S.: Magnetic heating by cobalt ferrite nanoparticles. - *Nanotechnology* 18, 34: 7 (2007).

(10) Byly nalezeny originální syntetické postupy vedoucí ke strukturně novým typům trikarbaboranů, substituovaným dikarbaboranům a od nich odvozeným metallakarbaboranům. Struktury uvedených sloučenin byly popsány elektronovou difrakcí.

Londesborough, M.G.S., Janoušek, Z., Štíbr, B., Hnyk, D., Plešek, J., Císařová, I.: The [2,5,12-C<sub>3</sub>B<sub>8</sub>H<sub>15</sub>]<sup>-</sup> anion, the first representative of the eleven-vertex hypophosphorane family of tricarbaboranes. - *Dalton Trans.*, 12: 1221-1228 (2007);

Štíbr, B., Holub, J., Bakardjiev, M., Janoušek Z.: Unusual interaction of alkynes with nine-vertex arachno-monocarbaboranes 4-CB<sub>8</sub>H<sub>14</sub> and [4-CB<sub>8</sub>H<sub>13</sub>]<sup>-</sup>. - *Dalton Trans.*, 5: 581-584 (2007).

(11) Byly nalezeny nové preparativní cesty ke sloučeninám boru s fúzovanými klastry (makropolyhedrální sloučeniny) a jejich derivátům. Tento typ sloučenin se uplatňuje v současné době ve světě k dopování polovodičových obvodů s vysokým stupněm integrace v mikroelektronice.

Carr, M.J., Perera, S.D., Jelinek, T., Štíbr, B., Clegg, W., Kilner, C.A., Kennedy, J.D.: Macropolyhedral boron-containing cluster chemistry. The unique nido-five-vertex-< B-2 >-nido-ten-vertex conjuncto structure of [(eta(5)-C<sub>5</sub>Me<sub>5</sub>)(2)Rh<sub>2</sub>B<sub>11</sub>H<sub>15</sub>] via an unexpected cluster-dismantling, - *Chem. Commun.* 34: 3559-3561 (2007);

Jelínek, T., Grüner, B., Císařová, I., Štíbr, B., Kennedy J. D.: Macropolyhedral boron-containing cluster chemistry. The reaction of syn-B<sub>18</sub>H<sub>22</sub> with SMe<sub>2</sub> and I<sub>2</sub> in monoglyme. Structure of [7-(SMe<sub>2</sub>)-syn-B<sub>18</sub>H<sub>20</sub>]. - *Inorg. Chem. Commun* 10, 125-128 (2007).

(12) Byla vyvinuta nová selektivní extrakční a komplexační činidla na bázi bi-topicky substituovaných calix[4]arenů pro izolaci Ln a Am ze silně kyselých roztoků.

Mikulášek, L., Grüner, B., Dordea, C., Rudzevich, V., Böhmer, V., Haddaoui, J., Hubscher, V., Arnaud-Neu, F.: Butyl-calix[4]arenes substituted at the narrow rim by cobalt bis(dicarbollide)(1-) and CMPO-groups. New efficient extractants for lanthanides and actinides. - *J. Org. Chem.* 28: 4772-4783 (2007).

(13) V rámci spolupráce s VŠCHT Praha a ÚOCHAB AV ČR, v. v. i. pokračoval

výzkum klastrových borových látek účinných proti resistantním kmenům HIV viru; na experimentální a teoretické úrovni byly prostudovány interakce karboranů s HIV proteasou.

Fanfrlík, J., Hnyk, D., Lepšík, M., Hobza, P.: Interaction of heteroboranes with biomolecules - Part 2. The effect of various metal vertices and exo-substitutions. - Phys. Chem. Chem. Phys. 9 (17): 2085-2093 (2007);

Buhl, M., Hnyk, D., Macháček J.: Computational studies of structures and properties of metallaboranes. Part 3: Protonated iron bis(dicarbollide), [3-Fe-(1,2-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>11</sub>)(2)H]<sup>(-)</sup>. - Inorg. Chem., 46(5): 1771-1777 (2007);

(14) Poprvé byla identifikována směsná Pb-Sb-Sn žluť ve středoevropské malbě 19. století, její příprava byla laboratorně ověřena a byl vyvinut postup pro její rozlišení od jiných Pb žlutí v reálných vzorcích maleb.

Hradil, D., Grygar, T., Hradilová, J., Bezdička, P., Grünwaldová, V., Fogoš, I., Miliani, C.: Microanalytical identification of Pb-Sb-Sn yellow pigment in historical European paintings and its differentiation from lead tin and Naples yellows. - J. Cultural Heritage 8/4: 377-386 (2007).

(15) Dalším příspěvkem ústavních pracovníků k řešení problémů spojených se zpracováním kamenců vznikajících při sanaci území po ukončené těžbě uranu loužením kyselinou sírovou je vypracování technologie využívající těchto odpadních síranů k výrobě epitaxně rostoucího oxidu hlinitého, vhodného k využití v materiálové chemii.

Černý, Z., Macháček J., Bezdička P., Hanykýř V., Roubíček P.: Způsob zpracování síranu hlinito-amonného, PV 2007-529.

(16) S cílem snížení spotřeby energie a zvýšení výkonu zařízení byla provedena analýza tavicích procesů skel a vytvořen model rozpouštění pevných částic a separace bublin v tavenině. Dále bylo popsáno působení sloučenin síry ve skelné tavenině. Výsledky budou využity k návrhu nových koncepcí tavení skel.

Kloužek, J., Arkosiová, M., Němec, L., Cincibusová, P.: The role of sulphur compounds in glass melting. - Glass Technol.: Eur. J. Glass Sci. Technol. A, 48, 4: 176-182 (2007);

Tonarová, V., Němec, L., Jebavá, M.: The bubble removal from glass melts in a rotating cylinder. - 9th International Seminar: Mathematical Modeling of Furnace Design and Operation, June 27-29, 2007, Velké Karlovice (CZ), p. 43-52;

Cincibusová, P., Němec, L., Jebavá, M.: The influence of glass flow character on bubble removal in horizontal channels. - 9th International Seminar: Mathematical Modeling of Furnace Design and Operation, June 27-29, 2007, Velké Karlovice (CZ), p. 33-42.

(17) Byla zkonstruována a úspěšně otestována elektroda na bázi polymerního elektrolytu, jejíž vlastnosti (mechanická odolnost, tepelná stabilita, možnost miniaturizace) umožňují použití v chemických senzorech plynů. Elektroda byla zároveň úspěšně použita pro měření v nevodných prostředích a pro měření v polymerech.

Reiter, J., Vondrák, J., Mička, Z.: Solid-state Cd-Cd<sup>2+</sup> reference electrode based on PMMA gel electrolytes, Solid State Ionics 177, 39-40: 3501-3506 (2007).

## 2. Vědecká a pedagogická spolupráce s vysokými školami

### 2a) Nejvýznamnější výsledky činnosti výzkumných center

2a-1) Centrum základního výzkumu *Perspektivní anorganické materiály*  
(Univerzita Pardubice a ÚACH AV ČR, v. v. i., poskytovatel dotace – MŠMT)

V návaznosti na dříve řešený projekt EUROPART byla dokončena příprava

účinných extrakčních činidel založených na vazbě kobalt bis(dikarbollidových) aniontů a funkčních organických skupin typu CMPO (karbamoyl metyl difenyl fosfin oxid) na užší okraj calix[4]arenové platformy, byly studovány metodiky k zavedení iontových hydrofobních klastrů a funkčních skupin na širší okraj calix[4]arenového skeletu a optimalizována geometrie molekul. Ve spolupráci s dalšími pracovišti byl dále studován vliv struktury na mechanismus inhibice HIV proteasy pomocí metallakarbaboranů. Pro tyto účely byly vyvinuty originální syntetické postupy vedoucí k amoniovým derivátům kobalt bis(dikarbollidu) a reaktivním derivátům kobalt bis(thiaundekaboranu). Byly připraveny a prostudovány vlastnosti nových iontových kapalin a elektrolytů s kovalentně vázanými aniony pro lithno-iontové baterie. Dále byly připraveny a testovány vlastnosti nových typů heterogenních katalyzátorů pro rozklad pevných částic uhlíku a nové typy fotokatalyzátorů na bázi TiO<sub>2</sub>; vlastnosti těchto materiálů byly úspěšně testovány v praktických aplikacích.

*Výsledkem práce tohoto „Centra“ je celkem 31 původních časopiseckých prací, 25 příspěvků na mezinárodních vědeckých konferencích a 5 příspěvků na vědeckých konferencích, pořádaných v České republice.*

2a-2) Centrum základního výzkumu *Příprava, modifikace a charakterizace materiálů energetickým zářením*  
(ÚJF AV ČR, v. v. i., ÚACH AV ČR, v. v. i., ČVUT, UJEP a VŠCHT Praha, poskytovatel dotace – MŠMT)

Byly vypracovány postupy chemické syntézy z roztoků pro částice drahých kovů ve tvaru drátků a tenkých destiček pro případné použití v nanoelektronice. Syntetické postupy umožňují připravit tyto částice s požadovaným tvarem a velikostí v poměrně širokých mezích a tím přizpůsobit jejich vlastnosti potřebám aplikací. V roce 2007 byly pokryty veškeré požadavky účastníků projektu na práce z oblasti elektronové mikroskopie (SEM, TEM, HRTEM), nezbytné pro řešení projektu. Výsledky těchto prací měly zásadní význam pro splnění cílů projektu v roce 2007, viz zpráva o řešení projektu v tomto roce.

2a-3) Centrum aplikovaného výzkumu *Výzkumné centrum pro nanopovrchové inženýrství*  
(ATG, a.s., ÚACH a ÚFCH J.H., AV ČR, v. v. i., VŠCHT Praha a TU Liberec, poskytovatel dotace – MŠMT)

Metodou homogenního srážení byly syntetizovány fotokatalyzátory na bázi TiO<sub>2</sub> se zvýšenou citlivostí ve viditelné oblasti spektra pomocí dopování Zr a kodopování oxidu titaničitého dvojicí N-F. Byla testována fotoaktivita připravených materiálů pomocí stanovení kinetiky fotoiniciovaného rozkladu modelové látky, 4-chlorfenolu. Výsledky prokázaly dobré fotokatalytické vlastnosti připravených materiálů. Vedle toho byly prostudovány některé vlastnosti katalyzátorů pro rozklad sazí a redukci NO<sub>x</sub>, připravených ve spolupráci se zahraničním pracovištěm.

Balek, V., Li, D., Šubrt, J., Večerníková, E., Hishita, S., Mitsuhashi, T., Haneda, H.: Characterization of nitrogen and fluorine co-doped titania photocatalyst: Effect of temperature on microstructure and surface activity properties. - J. Phys. Chem. Solids 68, 5-6: 770-774 (2007);

Balek, V., Li, D., Šubrt, J., Večerníková, E., Hishita, S., Mitsuhashi, T., Haneda, H.: Characterization of nitrogen and fluorine co-doped titania photocatalyst: Effect of temperature on microstructure and surface activity properties. - J. Phys. Chem. Solids 68, 5-6: 770-774 (2007);

Labhsetwar, N., Minamino, H., Mukherjee, M., Mitsuhashi, T., Rayalu, S., Dhakad, M., Haneda, H., Šubrt, J., Devotta, S.: Catalytic properties of Ru-mordenite for NO reduction. - J. Mol. Catal. A-

Chem. 261, 2: 213-217 (2007);  
Labhsetwar, N. K., Dhakad, M., Rayalu, S. S., Kumar, R., Šubrt, J., Haneda, H., Devotta, S., Mitsuhashi, T.: Thermally stable metal ruthenate based soot oxidation catalyst for diesel exhaust emission control. - *Top. Catal.* 42-43, 1-4: 299-302 (2007);  
Lukáč, J., Klementová, M., Bezdička, P., Bakardjieva, S., Šubrt, J., Szatmary, L., Bastl, Z., Jirkovský, J.: Influence of Zr as TiO<sub>2</sub> doping ion on photocatalytic degradation of 4-chlorophenol. - *Appl. Catal. B-Environ.* 74, 1-2: 83-91 (2007);  
Lukáč, J., Klementová, M., Bezdička, P., Bakardjieva, S., Šubrt, J., Szatmary, L., Grusková, A.: Characterization of Zr-doped TiO<sub>2</sub> prepared by homogenous co-precipitation without high-temperature treatment. - *J. Mater. Sci.* 42, 22: 9421-9428 (2007).

## 2b) Nejvýznamnější výsledky činnosti společných laboratoří

2b-1) Laboratoř fyziky nízkých teplot (společné pracoviště ÚACH AV ČR, v. v. i., FzÚ AV ČR, v. v. i., MFF UK a PřF UK)

Činnost pracoviště byla zaměřena na využití Mössbauerovy spektroskopie pro charakterizaci nanokompozitních magnetických materiálů obsahujících železo.

*Lančok, A., Kaňuch, T., Fendrych, F., Závěta, K., Kohout, J., Miglierini, M.: Studies of Fe-Co Nanocomposite Thin Films, CSMAG'07 – oral presentation;*  
*Lančok, A., Bezdička, P., Klementová, M., Závěta, K., Savii, C.: Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub> Hybrid Nanocomposites studied mainly by Mossbauer Spectroscopy, CSMAG'07 – poster;*  
*Lančok, A., Závěta, K., Kaňuch, T., Miglierini, M., Kančík, J., Postava, K., Kohout, J., Životský, O.: Study of Hyperfine Interactions of Nanocomposite Films, ICAME'07 – poster;*  
*Lančok, A., Moessbauer Spectroscopy in Prague – presentation at University of Pune, India;*  
*Fendrych, F., Řepa, P., Peksa, L., Gronych, L., Poltírová-Vejpravová, J., Lančok, A., Hedvábný, P., Shafer, P., Seeman, K. M.: UHV plasma jet system for deposition of magnetic nitride nanocomposite films with GHz applications, IVC-17/ICSS-13 and ICN+T2007 Congress Stockholm – poster.*

2b-2) Laboratoř anorganických materiálů (společné pracoviště ÚACH AV ČR, v. v. i. a VŠCHT Praha)

Byla získána výpočetní i experimentální data a navrženy dílčí modely pro pokročilá uspořádání procesů tavení skel.

*Kloužek, J., Arkosiová, M., Němec, L., Cincibusová, P.: The role of sulphur compounds in glass melting. – Glass Technol.: Eur. J. Glass Sci. Technol. A, 48, 4: 176-182 (2007);*  
*Tonarová, V., Němec, L., Jebavá, M.: The bubble removal from glass melts in a rotating cylinder. – Proceedings of the 9th International Seminar: Mathematical Modeling of Furnace Design and Operation, June 27-29, 2007, Velké Karlovice (CZ), p. 43-52*

2b-3) Akademická laboratoř materiálového průzkumu malířských děl (společné pracoviště ÚACH AV ČR, v. v. i. a AVU Praha)

Byly nalezeny materiálové znaky charakteristické pro výtvarnou školu s centrem v polském Krakově, působící v regionu Malopolska a severovýchodního Slovenska v 15. století. Analýzy pigmentů na bázi Fe poukazují na to, že dílna tzv. Mistra Matejovského oltáře preferovala regionální přírodní zdroje při výběru výtvarných materiálů a tento znak může být přímo využit pro autentikaci a správné historické zařazení sporných děl té doby a prostředí.

*Hradil, D., Hradilová, J., Bezdička, P., Švarcová, S.: Provenance study of Gothic paintings from North-East Slovakia by hand-held XRF, microscopy and X-ray microdiffraction. (X-ray Spektrometry, in print).*

## **2c) Další vědecké výsledky smluvní spolupráce s vysokými školami**

- FChT VŠCHT: Byly připraveny nové typy kalixarénových konjugátů, které selektivně vážou fullereny a kationty alkalických kovů; byl vyvinut nový způsob výroby fotokatalytických pigmentů na bázi  $\text{TiO}_2$  a kaolinitu; byly charakterizovány biokompatibilní vrstvy fosfátů vápenatých na speciálních Ti slitinách.
- FChT VŠCHT a PřF UK: Byl připraven nový typ porfyrin-karboranového konjugátu, který inhibuje HIV proteázu; bylo zjištěno, že interkalované porfyrinové senzitizery do hydrotalcitových nosičů zůstávají fotoaktivní a produkují reaktivní singletový kyslík.
- PřF UK: Bylo vysvětleno magnetické chování nanočástic  $\text{MgFe}_2\text{O}_4$  v závislosti na teplotě, velikosti a distribuci velikosti částic samotných. Byla stanovena distribuce iontů ve spinelové struktuře tohoto feritu; byly stanoveny složky strusek z metalurgie Pb.
- 1. LF UK: Bylo prokázáno, že diabetes a deprese způsobují nárůst obsahu kyslíkových radikálů v biologických vzorcích.
- 3. LF UK: Bylo zjištěno, že koncentrace kyslíkových a dusíkových radikálů narůstá během bolesti.
- FChT Univerzita Pardubice: Byly identifikovány produkty krystalizace materiálů pro optický záznam informací ve třech podsystémech Ag - (Sb, As) - (S, Se), dále pak identifikovány oxidické formy vanadu na mezoporézních  $\text{SiO}_2$  a popsán jejich vztah ke katalytické aktivitě při ODH propanu.
- VŠ textilní Liberec, PřF UK: Byla připravena nanovlákna, která mají na světle baktericidní vlastnosti
- PřF MU: Bylo interpretováno vysokoteplotní chování a krystalizace nanomateriálů na bázi železa připravených sonochemickou syntézou.
- FŽP UJEP: Byly popsány sorpční vlastnosti humátů pro těžké kovy.

## **2d) Spolupráce s vysokými školami při uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů**

### 2d-1) Bakalářské a magisterské studijní programy:

Pracovníci ústavu se podílejí na zajištění přednášek, seminářů, vedení prací a přípravě studijních textů v BSP Anorganická chemie (PřF UK), Chemie a technologie materiálů (VŠCHT Praha) a Elektrotechnika, elektronika, komunikační a řídicí technika (VUT Brno) a v MSP Anorganická chemie (PřF UK), Analytická chemie (PřF UK), Chemie a technologie materiálů (VŠCHT Praha), Chemie polymerů (VŠCHT Praha) a Elektrotechnika, elektronika, komunikační a řídicí technika (VUT Brno). Působí rovněž ve zkušebních komisích.

V r. 2007 odpřednášeli pracovníci ústavu v uvedených programech 296 hodin.

### 2d-2) Doktorské studijní programy:

V rámci společných akreditací s:

- VŠCHT v DSP Anorganická chemie, Anorganická technologie a Chemie a technologie materiálů,

- PřF UK v DSP Anorganická chemie, Analytická chemie a Fyzikální chemie
- a Univerzitou Pardubice v DSP Anorganická chemie, Anorganická technologie a Chemie a technologie materiálů

se pracovníci ústavu podílejí na výuce a vedení doktorských prací a působí v oborových radách uvedených DSP. V r. 2007 odpřednášeli pracovníci ústavu v uvedených programech 46 hodin.

K 31. 12. 2007 pracovalo pod supervizí ústavních školitelů 26 studentů DSP, z toho 4 cizinci. V tomto roce obhájilo své disertační práce 5 studentů; všichni byli atestováni jako postdoktorandi a pracují dále na ústavu.

### **3. Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou**

#### **3a) Společné projekty VaV podporované z veřejných prostředků**

3a-1) *Nové skelné a keramické materiály a pokročilé postupy jejich příprav a výrob*  
partner České lupkové závody, poskytovatel MPO - projekt 2A-1TP1/063, a.s.

Výsledek: Byl vypracován nový způsob zpracování kamence hlinitoamonného na prekurzory oxidu hlinitého a dále nový způsob výroby fotokatalytických pigmentů.

*Způsob zpracování síranu hlinitoamonného - v patentovém řízení, PV 2007 - 529. Způsob výroby fotokatalytických pigmentů - v patentovém řízení, PV 2007 - 627.*

3a-2) *Nanodispersní oxidy a hydroxidy Ti, Fe, Al, Zn a Zr pro destrukci chemických bojových látek,*  
partner ROKOSPOL, a.s., poskytovatel MPO – projekt 1H-PK2/5.

Výsledek: Byly připraveny a charakterizovány nové typy aktivních materiálů pro rozklad bojových chemických látek.

Houšková, V., Štengl, V., Bakardjieva, S., Murafa, N., Kalendová, A., Opluštil, F.: Zinc oxide prepared by homogeneous hydrolysis with thioacetamide, its destruction of warfare agents, and photocatalytic activity. - J. Phys. Chem. A 111, 20: 4215-4221 (2007);

Houšková, V., Štengl, V., Bakardjieva, S., Murafa, N., Kalendová, A., Opluštil, F.: Nanostructure materials for destruction of warfare agents and eco-toxins prepared by homogeneous hydrolysis with thioacetamide: Part 1 - zinc oxide. - J. Phys. Chem. Solids 68, 5-6: 716-720 (2007);

3a-3) *Příprava vodivých a polovodivých polymerů dopovaných nanočásticemi a nanotrubičkami na bázi uhlíku*

partner: : MEGA SYSTEM, s.r.o., NANOGIES, s.r.o., poskytovatel MPO – projekt FI-IM3/061

Výsledek: Delaminací ultrazvukem se podařilo připravit z komerčních materiálů (sazí) nanočástice uhlíku, které po dispergaci do pojiv vykazují vysokou elektrickou vodivost. Získané poznatky jsou testovány při výrobě topných panelů.

3a-4) *Výzkum polovodivých nanotrubiček pro realizaci studenoemisních součástek*  
partner Starmans electronics, s.r.o., poskytovatel MPO – projekt FT-TA4/126

Byla uskutečněna syntéza a charakterizace titaničitanových nanotrubiček. Materiály jsou testovány z hlediska užitných vlastností.

**3a-5) Výzkum příprav nanoforem vrstevnatých piezoelektrik pro realizaci výroby vysokoteplotních ultrazvukových měničů**

partner Starmans electronics, s.r.o., poskytovatel MPO – projekt 2A-1TP1/092

Výsledek: Byly změřeny XRD a TG-DTA a DSC dodaných práškových vzorků. Ze vzorků byly připraveny keramické tablety a kompozitní folie, které jsou v současné době studovány pomocí fyzikálních měření ve firmách Starmans electronics, s.r.o. a Piezoceram, s.r.o..

**3a-6) Příprava a studium vlastností organicko-anorganických nanokompozitních materiálů připravených in situ emulzní polymerizací**

partner Hexion Specialty Chemicals, poskytovatel AV – Program Nanotechnologie pro společnost

Výsledek: Byly připraveny organo-anorganické disperze akrylátů obsahující chemicky modifikované jílové částice; tyto nátěrové hmoty a lepidla vykazují lepší mechanické vlastnosti a sníženou propustnost pro plyny.

**3a-7) Nanokrystalizace plazmových nástřiků na bázi eutektických směsí keramik**

partner Eutit, s.r.o., poskytovatel AV – Program Nanotechnologie pro společnost

Výsledek: Bylo prokázáno zvýšení mikrotvrdosti a odolnosti proti otěru v důsledku krystalizace původně amorfních plazmových nástřiků v soustavě oxid zirkoničitý-oxid hlinitý-oxid křemičitý

Chráška, T., Klementová M., Hostomský, J.: Influence of silica on formation of nanocomposite alumina-zirconia ceramics. - Acta Technica CSAV, v tisku.

**3a-8) Nanostrukturní materiály pro katalytické, elektrokatalytické a sorbční aplikace**

partneři ÚJV, a.s., Eurosupport Manufact. Czechia; poskytovatel AV – Program Nanotechnologie pro společnost

Výsledek: Byla připravena a charakterizována řada sorbentů na bázi TiO<sub>2</sub> pro testování sorbce radioaktivního izotopu cesia.

**3a-9) Akumulace energie z obnovitelných zdrojů**

partner Solartech, s.r.o., Rožnov p. R., poskytovatel MŽP

Výsledek: Zdařila se syntéza nové anexové membrány pro levné palivové články typu vodík – vzduch a vývoj kladné elektrody na bázi oxidů manganu pro tento článek.

**3b) Výsledky VaV dosažené na základě hospodářských smluv**

V r. 2007 bylo uzavřeno 29 hospodářských smluv.

Nejvýznamnějšími výsledky jsou:

- Technicko-ekonomické posouzení výroby mullitických prekurzorů z kamence v Diamu st. p.; srovnávací studie (zadavatel Tebodín a.s.)
- Vypracování srovnávací studie Synhydridu a Vitridu (USA) a vytvoření nové databáze použití Synhydridu; obchodní využití (zadavatel Lučební závody Kolín a.s.)

- Provedení modifikace vlastností termočlánků Pt.Rh žiháním za vysokých teplot; inovace technologie (zadavatel Safina, a.s.)
- Stanovení měrných kapacit materiálů připravených insercí lithia do nanotubic na bázi sloučenin titanu s potenciálním využitím v Li-iontových bateriích (zadavatel Elmarco, a.s.)
- Určení oblasti stability modifikací Ni(OH)<sub>2</sub>; využití při výrobě akumulátorů (zadavatel Bochemie, a.s.)

### 3c) Odborné expertizy zpracované v písemné formě pro státní orgány a instituce

Bylo zpracováno 47 expertíz, především posudky návrhů projektů pro GA ČR, GA AV ČR a MŠMT, recenze odborných článků pro zahraniční vědecké časopisy a posudky disertačních prací.

## 4. Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště

### 4a) Projekty řešené v rámci mezinárodních vědeckých programů

4a-1) Synthesis of weakly nucleophilic anions of [CB<sub>n</sub>H<sub>n+1</sub>]<sup>-</sup> type in the series of deltahedral carbaborate anions / Syntéza slabě nukleofilních aniontů typu [CB<sub>n</sub>H<sub>n+1</sub>]<sup>-</sup> v řadě deltahedrálních karbaborátových aniontů; NSF- EAPSI, ELECTROCHEMISTRY & SURFACE CHE, OISE-No. 0532040 International Network: Education and Research on Energy and Nanoscience /KONTAKT, ME 857 (zahraniční partner University of Colorado at Boulder, USA).

Výsledek: Byla provedena syntéza málo nukleofilních, slabě koordinujících karbaborátových aniontů vhodných pro použití v katalýze či se zajímavými optickými vlastnostmi a potenciální aplikací v lithiových bateriích, palivových článkách a oblasti katalyzátorů pro polymeraci olefinů

Štíbr, B., Holub, J., Bakardžieva, M., Janoušek, Z.: Unusual interaction of alkynes with nine-vertex arachno-monocarbaboranes 4-CB<sub>8</sub>H<sub>14</sub> and [4-CB<sub>8</sub>H<sub>13</sub>]<sup>-</sup> in 4<sup>th</sup> European Meeting on Boron Chemistry, Euroborn IV, Univ. Bremen, SRN, P24, p.106. September 2-6th.

4a-2) Selective separation of lanthanides, actinides, palladium and ruthenium using pre-organized matrices bearing phosphorus based functional groups / Selektivní separace lanthanidů, aktinidů, palladia a ruthenia pomocí preorganizovaných matic s fosforovými funkčními skupinami; ISTC/STCU (zahraniční partneři Rusko, Ukrajina, Francie, Itálie).

Výsledek: Byla připravena nová extrakční činidla pro zpracování jaderných odpadů a přepracování paliv s potenciálním uplatněním v jaderné technologii pro izolaci Ln/An(III) a Pd(II) ze štěpných směsí.

4a-3) Synthesis and study of transition metal complexes containing new 11-vertex heteroborane anions as ligands / Syntéza a studium komplexů přechodných kovů s novými 11-ti vrcholovými heteroboranovými monoanionty; INTAS (zahraniční partneři Itálie, Rusko, Španělsko).

Výsledek: Byla syntetizována nová cyklopentadienová analoga metallaheterokarbaboranů, provedena inserce přechodných kovů do jejich klastru a komplexy byly charakterizovány pomocí spektroskopických a elektrochemických metod s potenciálním uplatněním jako stálejší analoga metallocénů v katalýze,

elektrochemii a optických materiálech.

Perekalin, D.S., Holub, J., Štíbr, B., Kudinov, A.R.: Synthesis and rearrangements of iron and cobalt complexes with a thiacarborane analogue of the cyclopentadienyl ligand. in 4<sup>th</sup> European Meeting on Boron Chemistry, Euroborn IV, Univ. Bremen, SRN, 60P0, p.141. September 2-6th, 2007. Univ. Bremen, SRN.

4a-4) Synthesis and analysis of samples representative of a nuclear reactor severe accident/ Syntéza a analýza vzorků reprezentujících vážné poškození atomového reaktoru; 06PPAR000121 Nuclear Material Analysis (zahraniční partner CEA-Cardache, Francie a ITE, Německo).

Výsledek: Byla provedena SEM a EDX analýza radioaktivního simulantu Corium VULCANO VB-U6 v rámci projektu SARNET (Ochrana jaderných energetických zařízení).

4a-5) Photo degradation – New (sub)micro structured materials applicable for destructive sorption and photo catalytic degradation of the BCW Agents occurring in process liquids, and waters / Fotodegradace- (sub)mikrostrukturální materiály využitelné pro destrukční sorpci a foto katalytickou degradaci otravných a biologických látek, přítomných v procesních kapalinách a vodě; Attainment of the Allied Declared Objectives - *Defence Research* (zahraniční partner FOI Umeå, Švédsko).

Výsledek: Byly připraveny a charakterizovány nové nanomateriály na bázi oxidu titanu, které vykazují mimořádnou účinnost při odbourávání otravných a biologických látek.

4a-6) Anisotropical energy transfer in hybrid nanomaterials based on layered silicates with organic dyes / Anizotropný prenos energie v hybridných nanomateriáloch vrstevnatých křemičitanov s organickými farbivami (zahraniční partneři National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japonsko a Ústav polymérov SAV, Slovensko).

Výsledek: Byly připraveny nové typy fotoaktivních křemičitanových vrstev.

Čeklovský, A., Czímerová, A., Lang, K., Bujdák, J.: Effect of the layer charge on the interaction of porphyrin dyes in layered silicates dispersions. J. Colloid Interface Sci., zasláno.

#### **4b) Konference s mezinárodní účastí, které ÚACH (spolu)pořádal**

4b-1) 9<sup>th</sup> International Seminar: Mathematical Modelling of Furnace Design and Operation / 9. Mezinárodní seminář: Matematické modelování sklářských pecí; počet účastníků 200, z toho 120 zahraničních.

4b-2) 8<sup>th</sup> Advanced Batteries and Accumulators / 8. Pokročilé baterie a akumulátory; počet účastníků 94, z toho 41 zahraničních.

4b-3) Glass Summer School / Letní sklářská škola; počet účastníků 40, z toho 20 zahraničních.

#### **4c) Aktuální dvoustranné dohody se zahraničními pracovišti**

4c-1) Téma: Speciální skla pro použití v infračervené oblasti; partner CEMA – Centre d'études des matériaux avancés, Francie.

4c-2) Téma: Nanokompozitní materiály, aplikace metody sol-gel, pokročilé materiály s význačnými magnetickými vlastnostmi; partner Romanian Academy-

Timisoara Branch, Rumunsko.

#### **4d – Další vědecké spolupráce se zahraničními partnery**

National Institute of Materials Science, Tsukuba, Japonsko (příprava nanolíšečkových materiálů);

Osaka University, Osaka, Japonsko (studium magnetoelektrických feritů);

University of Southampton, Southampton, Velká Británie (příprava a studium nanomateriálů a studium transportu v lyotropních kapalných krystalech);

Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg; Strasbourg; Francie (příprava a charakterizace nanokompozitů);

Laboratoire des Matériaux Inorganiques, Université Blaise Pascal, Aubiere Cedex, Francie (orientované filmy, orientace interkalátů v podvojných hydroxidech);

INASMET-Tecnalia, technologický park, San Sebastian, Španělsko (speciální metalokeramika na bázi geopolymerů);

Verres et Céramiques, Université de Rennes I, Rennes, Francie (chalkogenidová skla pro optoelektroniku);

Laboratory of Metallurgy, Department of Materials Science and Engineering, Vuorimiehentie 2K, Espoo, Finsko (mechanochemická syntéza nanočástic vícesložkových oxidů kovů);

Swiss Federal Laboratory for Materials Testing and Research EMPA, Dept Solid State Chemistry and Catalysis, Dübendorf, Switzerland (syntéza a charakterizace materiálů s význačnými termoelektrickými vlastnostmi na bázi n- a p- perovskitů);

Romanian Academy-Timisoara Branch; Timisoara; Rumunsko (magnetické nanokompozitní materiály);

IGIC Bulharská akademie věd; Sofia; Bulharsko (struktura a dielektrické vlastnosti vybraných sloučenin glycinu, s důrazem na jejich využití v elektronice);

Johannes Gutenberg Universität, Mainz, Německo (spolupráce v oblasti vývoje iontových calixarenů pro extrakci a komplexaci kationtů kovů);

Vanderbilt University, Nashville, USA (spolupráce v oblasti použití lineárních ferratrikarbolidových tyčinek pro kapalně krystalové a chemie málo koordinujících aniontů);

Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr, SRN (teoretická chemie zaměřená na heteroborany a metalla bis(dikarbolidy));

School of Chemistry, University of Edinburgh, VB (elektronová difrakce a strukturní výpočty);

National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovinsko (nové elektrolyty pro středně-teplotní lithno-iontové baterie);

GeoForschungZentrum Potsdam, Německo (analýza sedimentů Bajkalského a Aralského jezera k rekonstrukci paleoklimatu);

Università Degli Studi di Perugia, Itálie (syntéza a charakterizace žlutí na bázi antimoničnanu olovnatého, tradičního uměleckého pigmentu);

Technische Universität München, Německo (mineralogická analýza kadaňské země zelené – tradičního jílového pigmentu se specifickými vlastnostmi);

Akademie výtvarných umění Bukurešť, Rumunsko, Národní výzkumný ústav pro konzervování/restaurování, Bukurešť, Rumunsko, University of Central Lancashire, Presto – UK (analýza gotických deskových maleb v Rumunsku);

Slovenská technická univerzita v Bratislave, Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave, Trnava, Slovensko (charakterizace speciálních skel dopovaných oxidy těžkých kovů);

Université de Biskra, Biskra, Alžírsko a Université de Skikda, Skikda, Alžírsko (speciální skelné materiály pro fotonické aplikace);

TNO Holland, Holandsko a Technical University of Aachen, Německo (netradiční způsoby přípravy skel);

ÚACH SAV Bratislava, a jeho společné pracoviště VILA, Slovensko (kvantitativní fázová analýza pigmentů v modelových barevných vrstvách a příprava evropského příhraničního projektu ČR a SR *Glass centrum*);

Technická univerzita Zvolen, Fakulta ekológie a environmentalistiky, Zvolen, Slovenská republika (zpracování kyselých důlních vod).

## **5. Vzdělávací činnost pracovníků ústavu**

Účast pracovníků ústavu při uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů je podrobně popsána v kapitole 2d). Pracovníci ústavu se v současnosti podílejí na přípravě akreditace pro PGS chemie na FŽP Univerzity J.E. Purkyně v Ústí n. L. a na přípravě studijních plánů magisterského studia PřF téže univerzity.

Kromě výše uvedených aktivit je pozornost věnována rovněž práci s vybranými studenty středních škol. Tři středoškoláci se pod vedením mladých vědeckých pracovníků účastnili řešení výzkumných úkolů v rámci programu Akademie věd ČR Otevřená věda. Práce jednoho z nich (*Polymery založené na boranech*) získala cenu České učené společnosti.

Pracovníci ústavu se rovněž aktivně podíleli na přednáškovém kurzu určeném středoškolským pedagogům (*Nové myšlenky pro výuku chemie na středních školách*).

## **6. Popularizační činnost**

Pracovníci ústavu v r. 2007 seznamovali veřejnost s nejzajímavějšími výsledky získanými při řešení úkolů badatelského výzkumu nejčastěji prostřednictvím České televize a Českého rozhlasu v pořadech PORT (ČT2), Popularis (ČT2), Leonardo (cyklus ČR), Kaleidoskop (ČR) a Nad věcí (ČR). Kromě toho je snahou pracovníků ústavu přiblížit veřejnosti i obsah a směřování činnosti ústavu v kontextu s vývojem chemie v mezinárodním kontextu. Během Dnů otevřených dveří pořádaných v rámci akce AV ČR Týden vědy a techniky 2007 navštívilo ústav téměř 200 hostů, čímž jsme se zařadili mezi šest nejnavštěvovanějších ústavů Akademie věd. Ke zdaru akce jsme přispěli dále 3 přednáškami na Národní třídě. Pro studenty a pedagogy pražských vysokých škol byly pořádány exkurze na pracoviště

elektronové mikroskopie a v rámci semináře Aktuální problémy fyziky nízkých teplot byl uspořádán cyklus 4 přednášek o Mössbauerově spektroskopii. Pracovníci ústavu se dále aktivně účastnili Dne vědy na pražských vysokých školách, Symposia umělecko-průmyslových škol a Letní sklářské školy.

#### **IV. Hodnocení další a jiné činnosti:**

ÚACH se nezabývá další a jinou činností.

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

Nedostatky v hospodaření nebyly shledány.

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

Ústav se stane členem konsorcia University Pardubice a ústavů Akademie věd ČR, které bude podávat návrh projektu *Centrum materiálového výzkumu Pardubice* pro financování v rámci OP VaVpl, prioritní osa 1 – Evropská centra excelence (rozpočet cca 2 mld. Kč). Zároveň připravujeme vlastní projekt *Centrum elektronové mikroskopie pro materiálový výzkum*, komplementární s výše uvedeným, pro financování v programu OP Vavpl, prioritní osa 2 – Regionální centra VaV (rozpočet cca 140 mil. Kč). Akceptování alespoň jednoho z projektů k financování by znamenalo signifikantní zlepšení přístrojového vybavení, kvalitativní změnu úrovně dosahovaných výsledků, navázání dalších spoluprací nejen s výzkumnými institucemi ale i s průmyslovými partnery.

Vedení ústavu důsledně dbá na vyhledávání možností aplikací výsledků badatelského výzkumu a uplatňování práv duševního vlastnictví v oblasti aplikovatelných výsledků. Příjmy z licenčních smluv uzavřených v r. 2007 budou po 10 let doplňovat rozpočet ústavu tvořený převážně dotacemi ze státních prostředků. Další licenční smlouvy jsou v přípravě.

#### **VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště:\*)**

Vývoj pracoviště se bude i nadále ubírat v souladu s Národním programem výzkumu a světovým trendem v oboru anorganické chemie, kterým je výzkum nových sloučenin s potenciálními aplikacemi cílenými na zlepšení kvality života společnosti, a to jak v oblasti hledání nových léčiv pro humánní medicínu, tak při řešení

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

environmentálních problémů spočívajících v monitorování, ochraně a zlepšení životního prostředí. Bude reflektovat společenskou poptávku po nových kvalifikovaných materiálech pro elektroniku a fotoniku, materiálech se specifickými fotokatalytickými vlastnostmi, kompozitech s novými vlastnostmi, materiálech pro biomedicínské aplikace, progresivních keramických materiálech a materiálech využívajících produkty z odpadů. Současné vědecké zaměření ústavu sleduje tento trend a svými výsledky spoluurčuje jeho rozvoj. Badatelský výzkum bude propojen s následujícími stádii výzkumu a vývoje s cílem zefektivnění využití výsledků VaV při inovacích stávajících technologických postupů a zavádění nových vyspělých technologií.

Materiálový výzkum bude v roce 2008 zaměřen na nalezení nových syntetických cest k přípravě vysoce účinných fotokatalyzátorů na bázi oxidu titaničitého se zvýšenou citlivostí v oblasti viditelného světla. Pozornost bude věnována i jejich uplatnění v oblasti samočisticích a ekologických nátěrů a také na využití průmyslových meziproduktů jako výchozích surovin. Další výzkumné úkoly spočívají v modifikaci amorfních alumosilikátových matic tepelně stabilním plnivem s využitím pro přípravu sklářských forem a v přípravě kombinovaných metalokeramických materiálů pro tepelně a mechanicky odolné konstrukční prvky transportních cest v elektrárnách a teplárnách. Bude pokračovat studium přírodních materiálů pro využití jako substrátů stabilizujících stříbrné nanočástice při úpravách vod.

Hlavní aktivita v oblasti chemie bóru bude zaměřena na pokračování vývoje biologicky aktivních klastrových sloučenin boru, s potenciálním využitím jako inhibitorů HIV proteasy a dalších virových enzymů. Bude probíhat kvantově chemické studium molekulových geometrií a elektronových struktur karboranů a heteroboranů s důrazem na substituované skelety a jejich interakce s biomolekulami. Dále bude pokračovat základní výzkum karboranů a metallakarbaboranů bohatých heteroatomy a nukleofilních karbaborátových anionů. Budou prováděny strukturní studie nových typů látek založené na chemických výpočtech a difrakčních studiích. Budou hledány cesty k přípravě nových typů komplexačních a extrakčních činidel.

Pozornost v oblasti bioanorganické chemie bude zaměřena na přípravu a charakterizaci vrstevnatých organo-hydrotalcitů s interkalovanými molekulami porfyrinů ve formě prášků a filmů, které mají výrazné fotosenzitizující vlastnosti. Dále bude pokračovat studium vztahu mezi volnými radikály v krevní plazmě a civilizačními chorobami, především při kombinaci cukrovka – deprese.

V oboru environmentální geochemie budou dokončeny analýzy jílových minerálů a karbonátů potřebné pro rekonstrukci paleoprostředí v kontinentálních pánvích Českého masivu a bude pokračovat studium povodňových sedimentů řeky Moravy.

Při řešení problematiky materiálového průzkumu uměleckých děl budou dokončeny analýzy reálných vzorků alterovaných pigmentů pro stanovení příčin a mechanismů poškození nástěnných maleb solemi. S využitím neinvazivní rtg fluorescenční analýzy bude pokračovat materiálový průzkum unikátních pozdně gotických oltářních celků v oblasti Sedmihradska.

V oblasti skelných materiálů bude pokračovat studium příprav speciálních skelných materiálů pro fotonické aplikace a skel a skleněných vláken propustných pro infračervené záření. Pozornost bude zaměřena rovněž na zkoumání skel v systémech oxidů a halogenidů těžkých kovů, chalkogenidových skel a u vybraných systémů budou zkoumány možnosti přípravy skelných vláken. Dále bude

vypracována studie využití kontinuálního tavicího prostoru pro homogenizační děje ve skelných taveninách, parametrická studie chování reaktivních bublin v odstředivém poli a zahájena studie o chemickém urychlování homogenizačních procesů ve skelných taveninách.

## VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí:\*)

Klíčovým problémem jaderné energetiky je produkce vysoce aktivních jaderných odpadů a doposud neuspokojivě vyřešené způsoby nakládání s touto zátěží. V důsledku toho dochází k celosvětovému hromadění vyhořelého paliva i jaderných odpadů. Skupina boru se již delší dobu podílí na vývoji extrakčních činidel pro extrakci radionuklidů z jaderných odpadů. Původní vynález vědců z ÚACH a ÚJV, činidlo pro extrakci radioaktivního Cs a Sr, byl již ověřen v průmyslovém měřítku v Ruské Federaci (přepracováno  $10^7$  Ci aktivity) i v USA (přepracování tanku v INEEL). Nově vyvíjené extrahenty reprezentují principiálně nový a originální přístup k extrakci lanthanoidů a aktinoidů a činidla vykazují výrazně vyšší účinnost i selektivitu. Lze předpokládat, že technologie využívající tento nový mechanismus extrakce by měla být velmi robustní jak z hlediska hydrolytické a radiační stability, tak možnosti činidla recyklovat. Výhodou je také minimalizace generovaného sekundárního jaderného odpadu.

Významnými příspěvky pracovníků ústavu pro řešení problematiky sanace území Stráž pod Rálskem po ukončené těžbě uranu podzemním loužením kyselinou sírovou jsou tři patentované technologie na přepracování odpadního kamence hlinitoamonného. První z nich, poskytující jako produkt hnojivo, byla již licencována a je v současnosti využívána. Druhá, směřovaná na výrobu vysoce kvalitní mulitové keramiky, byla patentována a jedná se o jejím využití. V r. 2007 bylo patentováno vypracování technologie využívající odpadních síranů k výrobě epitaxně rostoucího oxidu hlinitého, vhodného k využití v materiálové chemii.

Pracovníci ústavu se intenzivně podílejí na výzkumu nanostrukturních oxidů s fotokatalytickým účinkem a vývoji standardních testovacích postupů pro charakterizaci jejich účinnosti. Tyto materiály za účasti slunečního záření aktivně rozkládají polutanty jako  $\text{NO}_x$  a těžké organické látky. V r. 2007 byly uzavřeny 2 licenční smlouvy ke komerčnímu využití know-how na výrobu fotokatalytických pigmentů na bázi oxidu titaničitého; uživatel licence používá tyto materiály jako aditivum do samočisticích nátěrových hmot. Výzkum v této oblasti pokračuje.

Další aktivity využitelné v oblasti ochrany životního prostředí:

Probíhá výzkum zaměřený na využití srážecích metod pro čištění vysoce kyselých důlních odpadních vod, obsahujících jako hlavní anorganické složky  $\text{Fe}^{3+}$  a  $\text{Al}^{3+}$ . Produktem srážení budou relativně čisté hydratované oxidy těchto prvků s vysokým měrným povrchem a možností aplikace jako sorbenty nebo pigmenty.

Výsledky studia produkce volných radikálů iniciované slunečním zářením na povrchu sinic (*Cyanobacteria*) mají za cíl nalezení způsobu odstraňování sinic z přírodních vod (spolupráce s Botanickým ústavem AV ČR).

Studium sorpčních vlastností humátů a dalších přírodních sorbentů ve spolupráci

s Fakultou životního prostředí UJEP, Ústí n.L., přináší poznatky cílené na využití těchto sorbentů při odstraňování škodlivých volných radikálů a toxických paramagnetických komplexů v životním prostředí.

Řešení projektu *Vztahy mezi klimatem, antropogenní činností a erozí krajiny zaznamenané v přírodních archívech Strážnického Pomoraví* má za cíl stanovení vlivu člověka na stabilitu povodí řeky Moravy. Projekt je zaměřen na využití sedimentárního archívu posledních 2-3 tisíciletí v oblasti, tradičně využívané v zemědělství, k rozlišení změn způsobených přirozenou změnou klimatu a antropogenními vlivy způsobujícími zesílenou erozi v povodí řeky.

Speciální skla propouštějící infračervené záření mají aplikační potenciál jako senzory koncentrace polutantů včetně CO<sub>2</sub> v plynech a uhlovodíků v plynech i kapalinách. Výzkum v oblasti tavení běžných i speciálních skel se soustřeďuje především na zvýšení intenzity procesu a podstatné snížení jeho velké energetické spotřeby. Úspory energií znamenají samozřejmě snížení emisí CO<sub>2</sub>.

>

## **IX. Aktivity v oblasti pracovněprávních vztahů: \*)**

V r. 2007 byli v souladu s Karierním řádem atestováni všichni vysokoškolsky vzdělaní pracovníci ústavu kromě administrativních pracovníků. S ohledem na výsledky atestací jsou s těmito pracovníky uzavřeny pracovní smlouvy na dobu určitou (1-4 roky). V pracovních smlouvách připravených na sklonku r. 2007 pro r. 2008 byly individuálně sníženy pracovní úvazky vědeckých pracovníků - pracujících důchodců a vytvořeny podmínky pro přijetí nových pracovníků k personálnímu posílení prosperujících problematik. Úsilí vedení ústavu je zaměřeno na rozvoj ústavu a dosažení excelence v oboru. Sledování a hodnocení produktivity a kvality výsledků pracovních týmů i jednotlivců umožňuje stanovit nejen současný stav, ale i tendenci. Motivační opatření spočívají v individuálním finančním ohodnocení a podpoře nejlepších týmů a jednotlivců i v jejich přístrojovém vybavení a personálním posílení.

Snahou vedení ústavu je finančně zajistit studenty DSP ve čtvrtém ročníku studia po ukončení výplaty stipendií a po obhajobě disertace umožnit nejschopnějším z nich zahájit vlastní vědeckou práci na ústavu. Toto se v r. 2007 podařilo v 5 případech. Při přijímání nových pracovníků (včetně zahraničních) je kladen důraz především na odbornost a vědeckou úroveň pracovníka.

razítko

podpis ředitele pracoviště AV ČR

**Přílohou výroční zprávy je účetní závěrka a zpráva o jejím auditu**

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

